

Über die Symmetrien der Symmetriegruppen:
Automorphismengruppen, Normalisatorgruppen
und charakteristische Untergruppen
von Symmetriegruppen, insbesondere der
kristallographischen Punkt- und Raumgruppen

INAUGURAL-DISSERTATION

zur Erlangung der Philosophischen Doktorwürde

vorgelegt der

Philosophischen Fakultät II
der
Universität Zürich

von

MARTIN GOTTLIEB GUBLER
von Müllheim (TG)

Begutachtet von den Herren
Prof. Dr. A. Niggli und Prof. Dr. P. Gabriel

Felben 1982
Eigenverlag

Über die Symmetrien der Symmetriegruppen:
Automorphismengruppen, Normalisatorgruppen
und charakteristische Untergruppen
von Symmetriegruppen, insbesondere der
kristallographischen Punkt- und Raumgruppen

INAUGURAL-DISSERTATION

zur Erlangung der Philosophischen Doktorwürde

vorgelegt der

Philosophischen Fakultät II
der
Universität Zürich

von

MARTIN GOTTLIEB GUBLER
von Müllheim (TG)

Begutachtet von den Herren
Prof. Dr. A. Niggli und Prof. Dr. P. Gabriel

Felben 1982
Eigenverlag



Herstellung: Ruckstuhl, CH-8581 Schocherswil

Verlag: Eigenverlag Martin Gubler, CH-8552 Felben

© Alle Rechte beim Autor.

Einleitung

In der Theorie der Farbgruppen oder der Untergruppen von Raumgruppen, bei der Definition von Orbit-Typen oder von Gitterkomplexen, bei der Diskussion von verschiedenen Aufstellungen oder Nullpunktswahlen und bei verwandten Problemen tauchen in der Kristallographie immer wieder Äquivalenzfragen auf, für deren präzise Behandlung die Normalisatorgruppen und Automorphismengruppen der Symmetriegruppen das adäquate Werkzeug sind.

Die vorliegende Arbeit richtet sich also vor allem an Kristallographen, die sich nicht scheuen, Begriffe aus der Mathematik (hier insbesondere der Gruppentheorie) zu übernehmen, um ihre präzisen Anschauungen auch präzise auszudrücken. Erst die mathematische Sprache erlaubt es, allgemeine Ableitungsmethoden herzuleiten und Beweise zu führen, die Anschauung kann durch die (gruppentheoretische) Berechnung geprüft werden.

So drücken die meisten der in dieser Arbeit eingeführten Begriffe für den Kristallographen anschaulich Vertrautes aus. Ich möchte das an zwei Beispielen belegen.

P. Niggli hat genaue Vorstellungen davon gehabt, welche Untergruppen von Punktgruppen zueinander konjugiert sind und welche durch äussere Automorphismen ineinander übergeführt werden. Figur 22 auf Seite 80/81 von [35] gibt genau den Verband $\mathcal{V}^{**}(\frac{622}{mmm})$ wieder, wobei er aber in der Darstellung nicht-konjugierte Digyren und Spiegelebenen sorgfältig unterscheidet (vgl. dazu Abschnitt 3.2 dieser Arbeit).

Als zweites Beispiel möchte ich die berühmten Cheshire - Gruppen von F.L. Hirshfeld [29] anführen, welche ganz anschaulich als Symmetriegruppe des Symmetriegerüsts eingeführt wurden, ohne dass die in dieser Arbeit dargestellten Zusammenhänge erkannt worden wären.

Die Arbeit sollte für jeden Kristallographen, der einige Grundkenntnisse in elementarer Gruppentheorie besitzt, ohne weiteres lesbar sein. Vom Mathematiker verlangen die Beispiele eine gewisse Vertrautheit mit der Hermann-Mauguin-Symbolik. Für die Bezeichnung der Symmetriegruppen wird allerdings eine erweiterte Hermann-Mauguin-Notation nach *Buchmann* verwendet. Diese wird im Anhang Teil C erläutert und gestattet es, auch teilweise kontinuierliche und kontinuierliche Gruppen von Isometrien zu bezeichnen.

An dieser Stelle möchte ich meinem Kristallographielehrer Herrn Prof. Dr. A. Niggli herzlich danken, und zwar sowohl für sein Interesse an dieser Arbeit wie überhaupt für seine Einführung in die Denkweise der Symmetriellehre. Ich danke auch meinem Mathematiklehrer Herrn Prof. Dr. P. Gabriel, ohne dessen Vorlesung über "Klassische Gruppen und Geometrie" diese Arbeit nie begonnen worden wäre. Dass die Arbeit aber auch einmal fertig wurde, verdanke ich vor allem auch der Hilfe von Frau M. Ungricht, die das Manuskript überhaupt erst lesbar machte. Zu grossem Dank bin ich auch Herrn Prof. Dr. H. Wondratschek verpflichtet. Seine kritischen Besprechungen von früheren Versionen dieser Arbeit veranlassten viele Verbesserungen und Ergänzungen. Schliesslich möchte ich noch diejenigen Kollegen dankbar erwähnen, die unter meinen Diskussionen am meisten "gelitten" haben: D. Altermatt, Felix Klaiber und Frau Dr. P. Schobinger-Papamantellos.

Unerwähnt bleiben hier all jene, die diese Arbeit ganz im Privaten unterstützt oder geduldet haben.

Martin Gubler

Zürich und Felben, im August 1981

Inhaltsverzeichnis

§ 1	Symmetriegruppen, ihre Normalisatorgruppen und Automorphismengruppen - eine Einleitung	1
1.1	Was sind Symmetriegruppen ?	1
1.2	Kristallographische Symmetriegruppen und Abbildungen zwischen Symmetriegruppen	4
1.3	Automorphismengruppen von Symmetriegruppen	16
1.4	Eine allgemeine Methode zur Ableitung der verschiedenen Automorphismengruppen	19
1.5	Die Normalisatorgruppen $N_A(G)$ und $N_E(G)$	23
§ 2	Punktgruppen	30
2.1	Punktgruppen oder Symmetriegruppen mit Fixpunkt ?	30
2.2	Zur Berechnung der Gruppen $N_A(G)$	33
2.3	Die Ableitung der übrigen Normalisator- gruppen	37
2.4	Die Ableitung der Zentralisatorgruppen	38
2.5	Zentren und Kommutatorgruppen der Punkt- gruppen	39
§ 3	Automorphismengruppen von Punktgruppen	43
3.1	Die Ableitung der Automorphismengruppen	43
3.2	Komprimierte Untergruppendiagramme	48

§ 4	Normalisatorgruppen von Symmetriegruppen - eine allgemeine Berechnungsmethode	53
4.1	Uebersicht über die verwendete Methode	53
4.2	Die Berechnung von $\Gamma_N(G)$	56
4.3	Die Suche nach einer oberen Schranke von $\widetilde{N}_A(G)$	60
4.4	Die Struktur der bei den dreidimensionalen Raumgruppen auftretenden affinen Normali- satorgruppen	65
4.5	Ist G normal in $N_A(G)^*$?	68
§ 5	Die Zentralisatorgruppen von Raumgruppen	74
§ 6	Automorphismengruppen von Raumgruppen	79
§ 7	Charakteristische Untergruppen von Raum- gruppen	88
7.1	Einleitung	88
7.2	Die kanonischen charakteristischen Unter- gruppen von Raumgruppen	91
7.3	Der Verband $\mathfrak{C}(G)$ bei den dreidimensio- nalen Raumgruppen	103
7.4	Einige weitere charakteristische Unter- gruppen von Raumgruppen	110

§ 8	Tabellen zu den Punktgruppen und Symmetriegruppen mit Fixpunkt	121
8.1	$N_A(G)$	122
8.2	$N_E(G)$, $N_E^+(G)$, $C_E(G)$, $C_E^+(G)$	125
8.3	Zentren und Kommutatorgruppen	126
8.4	Automorphismengruppen	127
8.5	Einige Beispiele von komprimierten Untergruppenverbänden	129
§ 9	Tabellen zu den dreidimensionalen Raumgruppen	132
9.1	Die Translationsgruppen $\Gamma_N(G)$	133
9.2	Normalisatorgruppen, Zentralisatorgruppen und Automorphismengruppen von dreidimensionalen Raumgruppen	134
§ 10	Historisches und Bibliographisches	161
10.1	Historische Bemerkungen und Literaturhinweise	161
10.2	Literaturverzeichnis	163
	<u>Anhang</u>	
Teil A	Uebersicht über die verschiedenen Gruppen von Raumtransformationen	169
Teil B	Zur Topologie der Transformationsgruppen	173
Teil C	Die Hermann-Mauguin-Buchmann-Notation der abgeschlossenen Gruppen von Isometrien	176



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41507215_0099

§ 1 Symmetriegruppen, ihre Normalisatorgruppen und Automorphismengruppen

1.1 Was sind Symmetriegruppen ?

Erstaunlicherweise ist es nötig, dieser Arbeit eine Definition des Begriffes "Symmetriegruppe" voranzustellen, obwohl sich hauptsächlich Kristallographen nun schon seit gut 100 Jahren mit solchen beschäftigen. Nachdem man zunächst nur *diskrete*, oder noch spezieller, nur *kristallographische* Symmetriegruppen untersucht hatte, begannen Alexander, Heesch und Schubnikov um 1930 damit, auch nicht-kristallographische Untergruppen der vollen Zylindergruppe sowie Gruppen mit kontinuierlichen Translationsrichtungen zu betrachten. All diesen Arbeiten liegt offenbar eine Definition des Begriffes "Symmetriegruppe" zugrunde, die mit der Forderung " G ist eine Untergruppe der Gruppe aller Isometrien" nicht erfasst wird. Es wird immer, mehr oder weniger stillschweigend, vorausgesetzt, dass eine Grösse (Drehwinkel, Länge des translativen Anteils), welche nicht diskrete Werte annimmt, kontinuierlich variieren soll.

Dieser *topologischen* Forderung wird die folgende Definition gerecht:

Definition 1 Eine n -dimensionale Symmetriegruppe ist eine topologisch abgeschlossene Untergruppe der Gruppe E aller Isometrien des n -dimensionalen reell-affinen euklidischen Raumes.

Diese Definition enthält die zusätzliche Forderung, dass die Gruppe *topologisch abgeschlossen* sein soll.

Im Anhang Teil B wird gezeigt, wie die Topologie der Transformationsgruppen mit der bekannten Topologie des $\mathbb{R}^n$ im Zusammenhang steht. Meistens genügt es aber, sich die folgende recht anschauliche Definition von Abgeschlossenheit einer Transformationsgruppe zu vergegenwärtigen:

Definition 2 Eine Gruppe G von Transformationen des affinen Raumes heisst abgeschlossen, falls für jede Folge g_i von Transformationen in G , welche eine Grenztransformation g_∞ besitzt, auch g_∞ zu G gehört.

g_∞ heisst dabei Grenztransformation oder Limes der Folge g_i , falls für jeden Punkt x die Punktfolge $g_i(x)$ gegen $g_\infty(x)$ konvergiert.

Betrachten wir als Beispiel die ebene Symmetriegruppe eines Kreises, also D_∞ . Nur wenige der Untergruppen von D_∞ sind topologisch abgeschlossen, nämlich C_n , D_n für natürliche Zahlen sowie C_∞ und D_∞ (Weyl [44] nennt sie die "Leonardo"-Gruppen). Ein einfaches Beispiel für eine nicht abgeschlossene Gruppe liefert jede zyklische Gruppe Z , die von einer Drehung $\frac{2\pi}{\psi}$ erzeugt wird, wo ψ eine irrationale Zahl ist. Wir können jede Drehung mit Elementen aus Z beliebig annähern, also z.B. auch eine Folge von Elementen in Z konstruieren, die gegen die Drehung um π konvergiert. π ist jedoch kein Element von Z , und somit ist Z also keine abgeschlossene Gruppe. Der topologische Abschluss von Z ist offenbar C_∞ , oder anders gesagt, Z liegt dicht in C_∞ .

Alle Aufzählungen der endlichen zweidimensionalen Punktgruppen enthalten immer nur die Leonardo-Gruppen, und auch die Aufzählungen [2, 26] aller (auch der nichtkristallographischen) Balkengruppen sind nur vollständig, wenn man ihnen die Definition 1 zugrunde legt.

Die Beschränkung auf topologisch abgeschlossene Gruppen von Transformationen ist allerdings angezeigt, werden doch physikalische Anordnungen durchwegs durch stetige Funktionen auf lokal abgeschlossene Teilmengen des Raumes beschrieben. Die Symmetriegruppe einer solchen Anordnung ist immer eine abgeschlossene Gruppe. Dabei ist A eine Symmetrie der Anordnung X , falls für alle Funktionen f an allen Orten x der Anordnung gilt $f(x) = f(A(x))$.

Dies heisst nun aber nicht, dass in allen physikalischen Zusammenhängen nur abgeschlossene Gruppen auftreten werden, denn z.B. Projektionen von abgeschlossenen Gruppen brauchen schon nicht mehr abgeschlossen zu sein. Die oben erwähnte unendliche zyklische Untergruppe Z von C_∞ kann als Projektion (Punktgruppe!) einer abgeschlossenen *helixartigen* Untergruppe der vollen Zylindergruppe $\frac{\infty}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ auftreten.

Der topologische Aspekt der Symmetriegruppen wird wohl deshalb so selten erwähnt, weil die Topologie der kristallographischen Gruppen so einfach ist: Die kristallographischen Gruppen sind immer *diskrete* Gruppen, d.h. der Abstand zweier Elemente ist immer grösser als ein bestimmtes Minimum $\epsilon > 0$, und so konvergiert eine Folge von Elementen genau dann, wenn sie konstant wird.

Eine ausgezeichnete Einführung in die Topologie gibt Kuratowsky in [32], einenicht allzu schwierige Einführung in topologische Gruppen und Lie-Gruppen bietet Pontrjagin [36]. Die Behandlung der Raumgruppen bei Schwarzenberger [39] stellt den topologischen Aspekt klar heraus. Dieses Buch enthält im Anhang auch eine Einführung in die Topologie und Algebra der Transformationsgruppen.

1.2 Kristallographische Symmetriegruppen und Abbildungen zwischen Symmetriegruppen

Der Kristallograph nennt gewisse Symmetriegruppen "kristallographisch". Damit wir diese Gruppen genau spezifizieren können, brauchen wir einige Begriffe:

- Ein m -dimensionales Gitter im Vektorraum $\vec{R}_m$ ist die Gesamtheit aller Vektoren $\mathbb{Z} \cdot \vec{v}_1 + \mathbb{Z} \cdot \vec{v}_2 + \dots + \mathbb{Z} \cdot \vec{v}_m$, wo die Vektoren $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_m$ linear unabhängig sind.
- Ein m -dimensionales Punktgitter im affinen Raum $\mathcal{R}$ ist die Gesamtheit aller Punkte $P + \vec{v}$, wo $\vec{v}$ ein Vektor aus einem m -dimensionalen Gitter im Vektorraum $\vec{R}_m$ und P ein Punkt im affinen Raum $\mathcal{R}$ ist.
- Eine Symmetriegruppe $G \subset E_n$ heisst "n-dimensionale Raumgruppe", falls die Translationsvektoren aller Translationen in G ein n -dimensionales Gitter in $\vec{R}_n$ aufspannen.

Lemma Für eine Symmetriegruppe $G \subset E_n$ sind die folgenden drei Bedingungen äquivalent:

- (i) G operiert auf einem n -dimensionalen Punktgitter
- (ii) G ist Untergruppe einer n -dimensionalen Raumgruppe
- (iii) Es existiert eine Basis $O, \vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n$ des affinen Raumes, so dass die Darstellungsmatrizen aller Elemente von G ganzzahlig sind.

Bevor wir das Lemma beweisen, wollen wir es dazu benützen zu definieren, welche Symmetriegruppen "kristallographisch" heissen sollen:

Definition 3 Eine Symmetriegruppe G heisst "kristallographisch", falls sie eine und damit alle Bedingungen des obigen Lemmas erfüllt.

Nun zum Beweis des Lemmas:

(i) $\Rightarrow$ (ii) : G operiere auf dem n -dim. Punktgitter Γ . Die Gruppe $H := \{h \in E \mid h(\mathcal{P}) = \mathcal{P}\}$ ist abgeschlossen, da $\mathcal{P}$ eine diskrete Punktmenge ist. Wegen $G(\mathcal{P}) = \mathcal{P}$ gilt $G \subset H$. H ist aber eine Raumgruppe: Eine Translation in H muss jeden Punkt von $\mathcal{P}$ in einen anderen Punkt von $\mathcal{P}$ überführen, die Translationsvektoren aller Translationen in H bilden also gerade das Gitter Γ , wenn $\mathcal{P} = P + \Gamma$ ist.

(ii) $\Rightarrow$ (iii) : Diese Implikation wird in Bieberbach [7], § 4 (p.408 - 410) gezeigt.

(iii) $\Rightarrow$ (i) : Sei $0, \vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n$ eine Basis des affinen Raumes, so dass die Darstellungsmatrizen aller Elemente von G ganzzahlig sind. Dann lässt G das n -dimensionale Punktgitter $0 + \mathbb{Z} \cdot \vec{v}_1 + \mathbb{Z} \cdot \vec{v}_2 + \dots + \mathbb{Z} \cdot \vec{v}_n$ invariant. $\square$

Die kristallographischen Gruppen sind also gerade die Untergruppen von Raumgruppen oder, damit gleichbedeutend, diejenigen Symmetriegruppen, die in einer affinen Basis als Gruppe ganzzahliger Matrizen geschrieben werden können.

Ausgehend von den Definitionen 1 und 3 wollen wir die folgenden Mengen einführen:

- $\text{Iso}(n)$ bezeichne die Menge aller n -dimensionalen Symmetriegruppen, also die Menge aller abgeschlossenen Untergruppen von E_n
- $\text{Krist}(n)$ bezeichne die Menge aller kristallographischen n -dimensionalen Symmetriegruppen

Die Elemente oder Objekte der Mengen $\text{Iso}(n)$ und vor allem $\text{Krist}(n)$ sind für $n \leq 3$ gut bekannt. Dagegen handeln nur sehr wenige Publikationen [7, 18, 30] von den Abbildungen zwischen Symmetriegruppen. Eine Kategorie von Objekten zu kennen (z.B. eben die Symmetriegruppen oder etwa die Vektorräume über einem bestimmten Körper), heisst aber nicht nur, deren Objekte zu kennen, sondern auch die strukturerhaltenden Abbildungen

oder *Morphismen* zwischen denselben zu überblicken. In der Kategorie der Gruppen z.B. sind die strukturerhaltenden Abbildungen oder Morphismen die wohlbekannten "Gruppenhomomorphismen", oder in der Kategorie der Vektorräume über einem bestimmten Körper sind die Morphismen die linearen Abbildungen. Bei den Symmetriegruppen müssen zwei strukturelle Merkmale erhalten bleiben:

- (i) Die Gruppenstruktur. Die Morphismen müssen also Gruppenhomomorphismen sein.
- (ii) Der geometrische Charakter der Gruppenelemente soll erhalten bleiben (sog. Normalform der Transformation). Zum Beispiel soll eine Schraubachse immer auf eine Schraubachse und nicht auf eine Gleitspiegelebene abgebildet werden. Das bedeutet, dass die Morphismen affine Unterräume (man denke an die Symmetrieelemente oder die Fix- und Fixpunkträume der Transformationen) in affine Unterräume derselben Dimension überführen sollen.

Beide Bedingungen zusammen ergeben die folgende natürliche und mindestens intuitiv wohlbekannte Definition eines Morphismus in der Kategorie $\text{Iso}(n)$ und $\text{Krist}(n)$:

Definition 4 Es seien G und H n -dimensionale Symmetriegruppen, also G und H Objekte von $\text{Iso}(n)$. Dann ist eine Abbildung $f: G \rightarrow H$ genau dann ein Morphismus in $\text{Iso}(n)$, falls eine affine Transformation a des n -dimensionalen Raumes existiert, so dass für alle $g \in G$ gilt:

$$f(g) = a \cdot g \cdot a^{-1}.$$

Jeder Morphismus in $\text{Iso}(n)$ und $\text{Krist}(n)$ entspricht also der Konjugation mit einer affinen Transformation. Daher sind alle Morphismen injektiv, d.h. es gilt

$$f(g) \neq f(h), \text{ falls } g \neq h$$

oder, mit anderen Worten, der Kern von f ist die triviale Untergruppe 1_G für jeden Morphismus $f: G \rightarrow H$ in $\text{Iso}(n)$ oder $\text{Krist}(n)$.

Zwei Symmetriegruppen sind offenbar isomorph in der Kategorie $\text{Iso}(n)$, wenn sie konjugierte Untergruppen der Gruppe A aller affinen Transformationen sind:

$$H = a \cdot G \cdot a^{-1} \quad \text{für ein } a \in A$$

Wir wollen aber im folgenden Gruppen, die in der Kategorie $\text{Iso}(n)$ "isomorph" sind, wie üblich "affin äquivalent" oder "affin konjugiert" nennen, damit keine Verwechslungen mit der Isomorphie in der Kategorie der Gruppen entstehen können. Affin äquivalente Symmetriegruppen sind notwendigerweise auch isomorph in der Kategorie der Gruppen (wegen Bedingung (i)), die Umkehrung ist aber bekanntlich falsch. So sind z.B. die Symmetriegruppen vom Typ 222 , 2_{mm} resp. $^2/m$ alle (gruppen-) isomorph zur sog. Klein'schen Vierergruppe, währenddem sie wegen Bedingung (ii) keinesfalls affin konjugiert sein können. Ein weiteres Beispiel: Die Balkengruppen $p2_1$ und pc sind beide isomorph zur Gruppe $\mathbb{Z}$ der ganzen Zahlen und daher auch isomorph zueinander als Gruppen (ein Isomorphismus ist gegeben durch die Zuordnung $2_1 \mapsto c$). Die beiden Symmetriegruppen sind aber nicht affin äquivalent, da z.B. die Gleitspiegelebene c kein Bild in $p2_1$ hat, das der Bedingung (ii) genügt.

Im allgemeinen sind also nur gewisse Gruppenhomomorphismen zwischen Symmetriegruppen auch Morphismen in $\text{Iso}(n)$. Es gilt aber ein berühmter Satz von Bieberbach [7], nach welchem jeder Gruppenisomorphismus zwischen Raumgruppen auch ein Isomorphismus in $\text{Krist}(n)$ ist. Die beiden Isomorphiebegriffe fallen also für Raumgruppen zusammen!

Die Kristallographen (so auch die International Tables) verwenden meistens eine verschärfte Version der Definition 4; indem nur affine Transformationen a mit positiver Determinante zugelassen werden. Entsprechend dieser schärferen Definition haben wir die bekannten

$$230 + 80 + 75 + 32$$

Aequivalenzklassen von Objekten in Krist(3). Lassen wir wie in Definition 3 auch affine Transformationen a mit negativer Determinante zu, so fallen elf enantiomorphe Paare von Raumgruppen und acht solche von Balkengruppen in je einer Klasse zusammen. Wir erhalten dann die Zahlen

$$219 + 80 + 67 + 32$$

1911 bewies Frobenius [18], dass die Zahl der Aequivalenzklassen von Raumgruppen in Krist(n) endlich ist für alle natürlichen Zahlen n . Dieses Resultat lässt sich leicht verallgemeinern, es gilt der folgende

Satz 1 Die Anzahl der Aequivalenzklassen von Objekten in Krist(n) ist endlich für jedes $n \in \mathbb{N}$.

Für den Beweis von Satz 1 wollen wir eine Notation von A. Niggli einführen: G_{n-k}^k bezeichne die Menge der direkten Aequivalenzklassen von Symmetriegruppen in Krist(n), welche ein genau k -dimensionales Translationsgitter aufweisen. Wir haben also die Mächtigkeit der folgenden Mengen abzuschätzen:

$$G_n^0, G_{n-1}^1, G_{n-2}^2, \dots, G_0^n$$

Nach Frobenius enthält G_0^n nur endlich viele Klassen (Raumgruppentypen). Klar ist weiter noch $|G_n^0| \leq |G_0^n|$, d.h. es gibt also höchstens so viele Punktgruppentypen wie Raumgruppentypen. Das Zeichen $<$ wäre hier falsch, im eindimensionalen Fall gilt nämlich die Gleichheit.

Für den Beweis von Satz 1 müssen wir also noch zeigen, dass die Mengen G_{n-k}^k endlich sind für $0 < k < n$. Das ergibt sich aus dem folgenden Satz über die Struktur und Ableitung der G_{n-k}^k -Gruppen:

Satz 2 Wir erhalten folgendermassen eine vollständige und injektive Aufzählung aller direkten Äquivalenzklassen von Gruppen in G_{n-k}^k :

1. Wir wählen aus einer Liste der G_0^k je einen Repräsentanten H .
2. Wir wählen aus einer Liste der G_{n-k}^0 je einen Repräsentanten K .
3. Wir erstellen zu jedem Repräsentanten K eine Liste der normalen Untergruppen L . In dieser Liste streichen wir wieder soviele Normalteiler L weg, dass von jeder Äquivalenzklasse genau einer übrig bleibt. Dabei heissen L und L' äquivalent, wenn ein $a \in A^+$ existiert mit $a \cdot K \cdot a^{-1} = K$ und $a \cdot L \cdot a^{-1} = L'$.
4. Wir erstellen zu jedem Tripel (H, K, L) unserer Liste eine Liste der surjektiven Gruppenhomomorphismen

$$f: H \longrightarrow K/L$$

5. Zwei solche Homomorphismen $f: H \longrightarrow K/L$ und $f': H' \longrightarrow K'/L'$ wollen wir äquivalent nennen, wenn Transformationen $a \in A_k$ und $b \in A_{n-k}$ existieren mit

$$\det(a) \cdot \det(b) > 0 ,$$

$$a \cdot H \cdot a^{-1} = H' , \quad b \cdot K \cdot b^{-1} = K' , \quad b \cdot L \cdot b^{-1} = L'$$

$$\text{und} \quad f'(a \cdot h \cdot a^{-1}) = b \cdot f(h) \cdot b^{-1}$$

Aus jeder dieser Äquivalenzklassen von Quadrupeln (H, K, L, f) wählen wir genau einen Repräsentanten.

6. Zu jedem Homomorphismus $f: H \longrightarrow K/L$ dieser Liste bilden wir die folgende Untergruppe G von $H \times K$:

$$G = \{ (a, x) \in H \times K \mid a \in H \text{ und } x \in f(a) \}$$

G interpretieren wir jetzt als Gruppe in $\text{Krist}(n)$:

Es ist ja $H \in \text{Krist}(k)$ und $K \in \text{Krist}(n-k)$. Wir lassen nun $H \times K$ auf dem n -dimensionalen Raum operieren, indem H und K auf orthogonalen Teilräumen T_1 resp. T_2 der Dimension k resp. $n-k$ operieren sollen.

Nach Satz 2 erhalten wir also Listen von G_{n-k}^k -Gruppen, und es wird behauptet, dass

- jede G_{n-k}^k -Gruppe direkt affin konjugiert ist zu einer Gruppe G aus unserer Liste
- zwei verschiedene Gruppen unserer Liste nicht direkt affin konjugiert sind.

Beweis von Satz 2

Zuerst bemerken wir, dass G nach Punkt 6 wohldefiniert ist. G soll ja eine Untergruppe des direkten Produkts $H \times K$ sein, die Multiplikation ist also gegeben durch

$$(a, x) \cdot (b, y) = (a \cdot b, x \cdot y)$$

$(1_H, 1_K) = (1_H, 1_L)$ ist Einselement von G und von $H \times K$, es ist $(1_H, 1_L) \in G$ wegen $f(1_H) = L$ und $1_L \in L$.

Ist $(a, x) \in G$, so auch $(a, x)^{-1} = (a^{-1}, x^{-1})$: Da f ein Homomorphismus und L ein Normalteiler ist, gilt

$$f(a^{-1}) = (f(a))^{-1} = (x \cdot L)^{-1} = x^{-1} \cdot L$$

Sind (a, x) und (b, y) in G , so auch $(a \cdot b, x \cdot y)$: Es ist $a \cdot b \in H$ und $x \cdot y \in K$, und wegen

$$f(a \cdot b) = f(a) \cdot f(b) = (x \cdot L) \cdot (y \cdot L) = x \cdot y \cdot L$$

ist auch $(a \cdot b, x \cdot y)$ in G .

Nun wollen wir zeigen, dass unsere Liste injektiv ist.

Seien also $f: H \rightarrow K/L$ und $f': H' \rightarrow K'/L'$ aus unserer Liste mit den zugehörigen Gruppen G resp. G' . Wir nehmen an, dass G und G' direkt affin konjugiert sind und müssen zeigen, dass f und f' nach der Definition von Punkt 5 äquivalent sind.

G und G' sind mit derselben Zerlegung des Raumes in $T_1 \oplus T_2$ konstruiert worden. Wählen wir eine entsprechende Basis, so ist die Matrix jedes Elements g sowohl von G als auch von G' von folgender Gestalt:

$$\begin{array}{l} T_1 - \\ T_2 - \end{array} \begin{array}{|c|c|c|} \hline \text{h} & 0 & \text{k} \\ \hline 0 & \text{k} & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \\ \hline \end{array}$$

$$g = (h, k)$$

Nun sind G und G' nach Voraussetzung äquivalent. Es existiert also eine Abbildung $a \in A_n^+$ mit $a \cdot G \cdot a^{-1} = G'$. a bildet die Translationen in G auf diejenigen in G' ab und lässt also den Teilraum T_1 invariant. Dem Beweis von Satz 1 in § 3 entnehmen wir, dass wir dann a schon so wählen können, dass auch $T_1^\perp = T_2$ invariant ist unter a . a lässt sich also ebenfalls als Paar (b, c) schreiben, wo b nur auf T_1 und c nur auf T_2 operiert. Da die Determinante von a positiv ist, gilt auch $\det(b) \cdot \det(c) = \det(a) > 0$. Nach der Konstruktion von G und G' gilt

$$b \cdot H \cdot b^{-1} = H' \quad \text{und} \quad c \cdot K \cdot c^{-1} = K'$$

L und L' sind bestimmt durch

$$L = \{x \in K \mid (l_H, x) \in G\}, \quad L' = \{y \in K' \mid (l_{H'}, y) \in G'\}$$

Die Menge der Elemente $(l, x) \in G$ wird aber durch a auf die Elemente der Gestalt $(l, y) \in G'$ konjugiert, also gilt auch

$$c \cdot L \cdot c^{-1} = L'$$

$$\begin{aligned} \text{Weiter ist} \quad f'(b \cdot h \cdot b^{-1}) &= \{y \in K' \mid (b \cdot h \cdot b^{-1}, y) \in G'\} = \\ &= \{y \in K' \mid (h, c^{-1} \cdot y \cdot c) \in G\} = \\ &= c \cdot \{x \in K \mid (h, x) \in G\} \cdot c^{-1} = \\ &= c \cdot f(h) \cdot c^{-1} \end{aligned}$$

Damit ist aber gezeigt, dass die Quadrupel (H, K, L, f) und (H', K', L', f') äquivalent sind.

Unsere Liste führt also dieselbe Äquivalenzklasse von G_{n-k}^k - Gruppen nicht zweimal auf. Ist aber auch jede G_{n-k}^k - Gruppe G' isomorph zu einer Gruppe G unserer Liste?

Sei G' also beliebig gegeben. OBdA dürfen wir annehmen, dass G' trivial auf der Zerlegung $T_1 \oplus T_2$ operiert lässt (sonst arbeiten wir mit einer äquivalenten Gruppe $j \cdot G' \cdot j^{-1}$ weiter, welche diese Zusatzbedingung erfüllt). Die Elemente von G lassen sich als Paare (h, k) schreiben, wo h auf T_1 und k auf T_2 operiert. In einem anschliessenden Lemma zeigen wir, dass alle Transformationen h mit $(h, k) \in G'$ eine k -dimensionale Raumgruppe H' bilden. Es ist also $H' = b \cdot H \cdot b^{-1}$ für ein H aus unserer Liste und ein $b \in A_K^+$. Ebenso zeigen wir, dass alle Transformationen k mit $(h, k) \in G'$ eine $(n-k)$ -dimensionale kristallographische Punktgruppe K' bilden. Es ist

also $K' = c \cdot K \cdot c^{-1}$ für ein K aus unserer Liste. Die Menge $\{m \in K' \mid (1_H, m) \in G'\}$ ist eine normale Untergruppe L' von K' . Also ist auch $c \cdot L' \cdot c^{-1}$ eine normale Untergruppe von $c \cdot K' \cdot c^{-1} = K$. $c \cdot L' \cdot c^{-1}$ ist daher konjugiert zu einer normalen Untergruppe L von K , die in unserer Liste auftritt. Es existiert also ein $d \in A_{n-k}^+$ mit $d \cdot K \cdot d^{-1} = K$ und $d \cdot c \cdot L' \cdot c^{-1} \cdot d^{-1} = L$. Die Abbildung $(b, d \cdot c)$ konjugiert also H' auf H , K' auf K und L' auf L , wo H, K und L in einem Quadrupel unserer Liste auftreten.

Zu H, K und L definieren wir nun einen Homomorphismus $f^*: H \longrightarrow K/L$ durch

$$f^*(h) = d \cdot c \cdot x \cdot c^{-1} \cdot d^{-1} \cdot L, \text{ wenn } (b^{-1} \cdot h \cdot b, x) \in G'$$

f^* ist wohldefiniert, denn zwei verschiedene Wahlen von x unterscheiden sich nur um ein Element in L' und liefern daher dieselbe Nebenklasse von L . f^* ist auch ein Gruppenhomomorphismus als "Kopie" der Abbildung

$$f' : H' \longrightarrow K'/L'$$

$$h \longmapsto x \cdot L', \text{ wenn } (h, x) \in G'$$

Unsere Liste enthält einen zu f^* äquivalenten Homomorphismus $f : \hat{H} \longrightarrow \hat{K}/\hat{L}$, d.h. es existieren Transformationen

$$e \in A_K \text{ und } i \in A_{n-k} \text{ mit } \det(e) \cdot \det(i) > 0, \\ e \cdot H \cdot e^{-1} = \hat{H}, \quad i \cdot K \cdot i^{-1} = \hat{K}, \quad i \cdot L \cdot i^{-1} = \hat{L} \quad \text{sodass} \\ f(e \cdot h \cdot e^{-1}) = i \cdot f^*(h) \cdot i^{-1}$$

Die Abbildung $(e \cdot b, i \cdot d \cdot c)$ konjugiert nun unsere Gruppe G' auf eine Gruppe $\hat{G}$ unserer Liste, welche durch das Quadrupel $(\hat{H}, \hat{K}, \hat{L}, f)$ gegeben ist.

Da G' eine beliebige G_{n-k}^k -Gruppe war, ist damit gezeigt, dass unsere Liste auch vollständig ist. □

Im Beweis von Satz 2 haben wir den folgenden Hilfssatz verwendet:

Lemma 3 Sei $G \in \text{Krist}(n)$, Γ_G spanne den Teilraum T von $\tilde{\mathcal{R}}_n$ auf. Jedes Element $g \in G$ lässt sich dann als Paar (h, k) schreiben, wo h nur auf T und k nur auf $T^\perp$ operiert. Die Dimension von T sei m (G ist also eine G_{n-m}^m -Gruppe). Es gilt dann folgendes:

- (i) $H = \{h \mid (h, k) \in G\}$ ist eine m -dimensionale Raumgruppe
- (ii) $K = \{k \mid (h, k) \in G\}$ ist eine $(n-m)$ -dimensionale kristallographische Punktgruppe

Beweis von (i): $|\tilde{G}|$, die Ordnung der Punktgruppe von G , ist endlich. Für alle $g \in G$ liegt also $g|\tilde{G}|$ in Γ_G . Die translativen Anteile aller Elemente von G liegen also in T , und es gilt

$\Gamma_G \subset \Gamma_H \subset \frac{1}{|\tilde{G}|} \cdot \Gamma_G$. Die erste Inklusion besagt, dass Γ_H m -dimensional ist, und die zweite garantiert, dass Γ_H diskret ist. H ist dann aber eine m -dimensionale Raumgruppe.

Beweis von (ii): Da G kristallographisch ist, ist G Untergruppe einer n -dimensionalen Raumgruppe F in $\mathcal{R}_n$. Für eine solche Raumgruppe F gilt $\Gamma_G \subset \Gamma_F$, und daher ist $\Gamma_F \cap T$ m -dimensional. Wir können also eine Basis $0, \vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n$ des Raumes so wählen, dass $\vec{v}_1$ bis $\vec{v}_m$ T aufspannen und die Darstellungsmatrizen aller Elemente von F (und damit auch von G) ganzzahlig sind. Gemäss der Zerlegung $\tilde{\mathcal{R}}_n = T \oplus T^\perp$ zerlegen wir die weiteren Basisvektoren:

$\vec{v}_{m+1} = \vec{s}_{m+1} + \vec{t}_{m+1}, \dots, \vec{v}_n = \vec{s}_n + \vec{t}_n$
mit $\vec{s}_i \in T$ und $\vec{t}_i \in T^\perp$. Da die Vektoren $(\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_m)$ linear unabhängig sind, müssen es auch die Vektoren $(\vec{t}_{m+1}, \dots, \vec{t}_n)$ in $T^\perp$ sein. Sie spannen also ein $(n-m)$ -dimensionales Gitter in $T^\perp$ auf. Alle Vektoren k mit $(h, k) \in G$ lassen nun dieses Gitter invariant: Bezeichne p die Projektion von $\tilde{\mathcal{R}}_n$ auf $T^\perp$. Es ist

$$k(\vec{t}_i) = p((h, k)(\vec{v}_i - \vec{s}_i)) = p(\text{ganzzahl. Linearkomb. von } \vec{v}_j) \\ = \text{ganzzahl. Linearkomb. der } \vec{t}_j$$

K ist demnach eine $(n-m)$ -dimensionale kristallographische Punktgruppe. □

Nun können wir endlich den Beweis von Satz 1 durchführen. Wir zeigen einfach, dass die Liste, wie wir sie nach Satz 2 erhalten, endlich ist für alle Klassen G_{n-k}^k .

Im ersten Schritt nach Satz 2 erstellen wir eine Liste der k -dimensionalen Raumgruppen H . Diese ist endlich nach Frobenius. Im zweiten Schritt erstellen wir eine (endliche) Liste der $(n-k)$ -dimensionalen kristallographischen Punktgruppen. Jede dieser Punktgruppen hat weiter nur endlich viele Normalteiler L . Also kommen insgesamt nur endlich viele Tripel (H, K, L) zur Weiterbearbeitung nach Schritt 4. Nun stellen wir noch fest, dass es überhaupt nur endlich viele Homomorphismen f von der endlich erzeugten Raumgruppe H in die endliche Faktorgruppe K/L gibt. $\square$

Bemerkung Im Satz 2 haben wir die Fälle $k = 0$ und $k = n$ nicht ausgeschlossen. Die Zerlegung des Raumes und der Gruppen ist dann trivial. Ist $k = n$, so erstellen wir einfach eine Liste der n -dimensionalen Raumgruppen und geben zu jeder noch den trivialen Homomorphismus auf die einzige Faktorgruppe $\{e\}/\{e\}$ in G_0^0 . Im anderen Extremfall ($k = 0$) ist $H = \{e\}$ immer trivial, und es gibt nur für die Paare (K, L) mit $K = L$ eine Surjektion $f: H \rightarrow K/L$. Daher bleibt in diesem Fall einzig eine Liste der n -dimensionalen kristallographischen Punktgruppen aufzustellen.

Soviel zu den kristallographischen Symmetriegruppen und deren zusammenfassung zu Klassen.

Die Äquivalenzklassen von $\text{Iso}(3)$ hat Buchmann in seiner Diplomarbeit [15] abgeleitet, wobei er die Äquivalenzklassen von $\text{Krist}(3)$ als bekannt voraussetzte. In seiner schönen

Uebersicht finden wir kristallographische und nicht-kristallographische, diskrete, teilkontinuierliche und kontinuierliche Symmetriegruppen, wie wir sie auch für die Betrachtung von *kristallographischen* Gruppen brauchen werden. Wir werden die Notation der Translationsgruppen aus dieser Arbeit von Buchmann übernehmen. Sie ist im Teil C des Anhangs ausführlich erläutert als Erweiterung der Hermann-Mauguin-Symbolik.

1.3 Automorphismengruppen von Symmetriegruppen

In jeder Kategorie können wir zu jedem Objekt diejenigen Morphismen betrachten, die G auf sich selbst abbilden. Die Isomorphismen eines Objekts G auf sich selbst heißen jeweils die Automorphismen von G . Die Automorphismen eines Objekts bilden eine Gruppe, die Multiplikation ist durch die Zusammensetzung (Hintereinander-Ausführung) der Automorphismen gegeben. Die Automorphismengruppe eines Objekts G beschreibt die "Symmetrie" von G in einem abstrakten Sinne und enthält damit allerhand Informationen über G .

Bis jetzt sind nur wenige Artikel über Automorphismengruppen von kristallographischen Gruppen erschienen, obwohl diese und vor allem die mit ihnen eng verwandten Normalisatorgruppen (siehe 1.4) von entscheidender Bedeutung sind bei allen Äquivalenzfragen, etwa bei der Definition äquivalenter Farbgruppen (Senechal), der Definition äquivalenter Untergruppen (Sayari, Billiet etc.), der Definition von Orbit-Typen (Wondratschek priv. com.) oder bei der Diskussion verschiedener äquivalenter Aufstellungen und Nullpunkt-Wahlen (Burzlaff/Zimmermann).

Beispiel Jede Untergruppe H einer Symmetriegruppe G liefert eine transitive Permutationsdarstellung von G auf den Nebenklassen von H . Zwei Untergruppen H und K liefern "dieselbe" Permutationsdarstellung von G , falls ein innerer Automorphismus von G existiert, der H auf K abbildet.

Weiter liefert jede Permutationsdarstellung von G auf den Nebenklassen einer Untergruppe eine transitive Farbgruppe über G . Zwei Untergruppen H und K liefern dabei "dieselbe" Farbgruppe, falls ein Automorphismus von G existiert, der H auf K abbildet. (Weitere Einzelheiten dazu findet man bei Senechal [40])

Wir wollen noch die Automorphismengruppen einer sehr kleinen Symmetriegruppe ableiten. Sei G vom Typ $2mm$. Jeder Automorphismus von G muss 2 auf sich selbst abbilden, wegen der Bedingung (ii) aus 1.2. Trivialerweise muss auch 1_G auf sich selbst abgebildet werden. So bleiben von den 6 Gruppenautomorphismen von $2mm$ nur zwei übrig, welche auch Automorphismen in Krist(3) sind: Die identische Selbstabbildung von G und diejenige Abbildung, welche m_x und m_y vertauscht. Das sind die kristallographisch "sinnvollen" Automorphismen von $2mm$.

Wir wollen mit A oder A_n die Gruppe aller affinen Transformationen des n -dimensionalen Raumes bezeichnen, E oder E_n bezeichne die Untergruppe aller Isometrien in A_n . (Vergl. Anhang Teil A über die verschiedenen Transformationsgruppen des affinen Raumes.) Zu jeder Symmetriegruppe $G \in \text{Iso}(n)$ interessieren uns die folgenden Automorphismengruppen:

$\text{Aut}(G)$ = Gruppe aller Abbildungen f von G auf sich selbst, welche der Konjugation von G durch eine affine Transformation $a \in A$ entsprechen, d.h.

$$f(g) = a \cdot g \cdot a^{-1} \quad \text{für alle } g \in G$$

$\text{Iso Aut}(G)$ = Gruppe aller Abbildungen f von G auf sich selbst, welche der Konjugation von G durch eine Isometrie $j \in E$ entsprechen, d.h.

$$f(g) = j \cdot g \cdot j^{-1} \quad \text{für alle } g \in G$$

$\text{Int}(G)$ = Gruppe aller Abbildungen f von G auf sich selbst, welche der Konjugation von G durch ein Element $h \in G$ entsprechen, d.h.

$$f(g) = h \cdot g \cdot h^{-1} \quad \text{für alle } g \in G$$

Diese Automorphismen-Gruppen entsprechen der Definition 3, wobei wir für Automorphismen in Iso Aut aber fordern, dass a in E liegt, und für *innere* Automorphismen soll a aus G selber stammen. Wenn wir von der verschärften Version von Definition 3 ausgehen und also zusätzlich fordern, dass die Determinante der Transformation, mit der G konjugiert wird, positiv sein soll, erhalten wir analog die drei Automorphismengruppen •

$$\begin{aligned} \text{Aut}^+(G) &= \left\{ f: G \rightarrow G \mid \begin{array}{l} f(g) = a \cdot g \cdot a^{-1} \text{ für alle} \\ g \text{ in } G, \text{ mit } a \in A, \det(a) > 0 \end{array} \right\} \\ \text{Iso Aut}^+(G) &= \left\{ f: G \rightarrow G \mid \begin{array}{l} f(g) = j \cdot g \cdot j^{-1} \text{ für alle} \\ g \text{ in } G, \text{ mit } j \in E, \det(j) > 0 \end{array} \right\} \\ \text{Int}^+(G) &= \left\{ f: G \rightarrow G \mid \begin{array}{l} f(g) = h \cdot g \cdot h^{-1} \text{ für alle} \\ g \text{ in } G, \text{ mit } h \in G, \det(h) > 0 \end{array} \right\} \end{aligned}$$

Diese sogenannten *direkten* Automorphismen erhalten den Drehsinn von Schraubachsen. Aus den Definitionen geht hervor, dass die folgenden Untergruppenbeziehungen gelten ($\subset$ immer im Sinne von $\subseteq$):

$$\begin{array}{ccccc} \text{Int}^+(G) & \subset & \text{Iso Aut}^+(G) & \subset & \text{Aut}^+(G) \\ \cap & & \cap & & \cap \\ \text{Int}(G) & \subset & \text{Iso Aut}(G) & \subset & \text{Aut}(G) \end{array}$$

Im allgemeinen sind alle diese Gruppen verschieden (siehe z.B. Beispiel 7 in § 6). Es können aber ohne weiteres verschiedene dieser Gruppen zusammenfallen (vgl. Beispiel 3 und Beispiel 8 in § 6).

Wir wollen uns nun überlegen, wie wir diese Automorphismen-Gruppen ableiten können.

1.4 Eine allgemeine Methode zur Ableitung der verschiedenen Automorphismengruppen von Symmetriegruppen

Sei jetzt G irgendeine Symmetriegruppe. Wie können wir zum Beispiel die Gruppe $\text{Iso Aut}(G)$ berechnen? Nach der Definition der Gruppe $\text{Iso Aut}(G)$ existiert zu jedem Automorphismus f in $\text{Iso Aut}(G)$ mindestens eine Isometrie j , welche auf G (durch Konjugation) gleich operiert wie f : $f(g) = j \cdot g \cdot j^{-1}$ für alle $g \in G$. Wenn wir also die Menge aller Isometrien j betrachten, für die gilt

$$j \cdot G \cdot j^{-1} = G,$$

so werden wir keinen Automorphismus in $\text{Iso Aut}(G)$ "vergessen". Diese Menge bildet nun aber sogar eine Gruppe:

$$j \cdot G \cdot j^{-1} = G \quad \text{und} \quad k \cdot G \cdot k^{-1} = G \quad \Rightarrow \quad (1)$$

$$(j \cdot k) \cdot G \cdot (j \cdot k)^{-1} = (j \cdot k) \cdot G \cdot (k^{-1} \cdot j^{-1}) =$$

$$j \cdot (k \cdot G \cdot k^{-1}) \cdot j^{-1} = j \cdot G \cdot j^{-1} = G$$

Diese Gruppe heisst *Normalisatorgruppe von G in E* und wird mit $N_E(G)$ bezeichnet. Die Gruppe $N_E(G)$ verdankt ihren Namen der Eigenschaft, dass sie die grösste Untergruppe von E ist, in welcher G eine normale Untergruppe ist. $N_E(G)$ enthält also alle Isometrien, welche G auf sich selbst konjugieren. Die Abbildung

$$\Phi : N_E(G) \rightarrow \text{Iso Aut}(G)$$

$$j \mapsto \text{Konjugation mit } j$$

ist somit surjektiv. (1) zeigt uns, dass Φ sogar ein Gruppenhomomorphismus ist. Somit können wir einen Isomorphiesatz der elementaren Gruppentheorie anwenden und schliessen, dass $\text{Iso Aut}(G)$ isomorph ist zur Faktorgruppe $\frac{N_E(G)}{\text{Kern von } \Phi}$.

Der Kern von $\mathfrak{I}$ besteht aus allen Elementen von $N_E(G)$, welche auf das Einselement der Gruppe $\text{Iso Aut}(G)$ abgebildet werden, d.h. welche die identische Selbstabbildung von G liefern. Damit ein Element $j \in N_E(G)$ im Kern von $\mathfrak{I}$ liegt, muss also gelten

$$j \cdot g \cdot j^{-1} = g \quad \text{für alle } g \in G$$

oder, damit gleichbedeutend, $j \cdot g = g \cdot j$ für alle $g \in G$. All diese Elemente bilden eine Gruppe (als Kern von $\mathfrak{I}$), und diese heisst Zentralisator von G in E . Die Aehnlichkeit des Namens mit dem Begriff "Zentrum" einer Gruppe ist nicht zufällig: Der Zentralisator einer Gruppe in einer Obergruppe ist tatsächlich eine Verallgemeinerung des Zentrums einer Gruppe. Ist $G \subset H$, so enthält der Zentralisator $C_H(G)$ alle Elemente von H , welche mit allen Elementen von G kommutieren. Im Spezialfall $G = H$ liefert diese Definition das Zentrum $Z(G)$ von G , es ist also $Z(G) = C_G(G)$.

Wir haben also eine Beschreibung der Automorphismengruppe $\text{Iso Aut}(G)$ durch den Quotienten zweier Transformationsgruppen gefunden, welche sich (wie sich herausstellen wird) zu jeder Symmetriegruppe berechnen lassen.

Wenn wir in dieser Herleitung E durch A resp. G ersetzen, erhalten wir analoge Darstellungen der Gruppen $\text{Aut}(G)$ und $\text{Int}(G)$:

$$\begin{aligned} \text{Aut}(G) &\cong \frac{\text{Normalisator von } G \text{ in } A}{\text{Zentralisator von } G \text{ in } A} = \frac{N_A(G)}{C_A(G)} \\ \text{Iso Aut}(G) &\cong \frac{\text{Normalisator von } G \text{ in } E}{\text{Zentralisator von } G \text{ in } E} = \frac{N_E(G)}{C_E(G)} \\ \text{Int}(G) &\cong \frac{\text{Normalisator von } G \text{ in } G}{\text{Zentralisator von } G \text{ in } G} = \frac{N_G(G)}{C_G(G)} = \frac{G}{Z(G)} \end{aligned}$$

Führen wir noch eine Notation ein: Für jede Transformationsgruppe $F \subset A$ bezeichne F^+ diejenige Untergruppe von F , welche alle Elemente mit positiver Determinante enthält. Die Definition der Gruppe $\text{Iso Aut}^+(G)$ in 1.3. könnten wir also wie folgt notieren:

$$\text{Iso Aut}^+(G) = \left\{ f: G \rightarrow G \mid \begin{array}{l} f(g) = j \cdot g \cdot j^{-1} \text{ für alle} \\ g \in G, \text{ mit } j \in E^+ \end{array} \right\}$$

Damit sind auch die Gruppen $N_A(G)^+$, $N_E(G)^+$ etc. definiert, und es gilt

$$\text{Aut}^+(G) = \frac{N_A(G)^+}{C_A(G)^+}$$

$$\text{Iso Aut}^+(G) = \frac{N_E(G)^+}{C_E(G)^+}$$

$$\text{Int}^+(G) = \frac{N_G(G)^+}{C_G(G)^+} = \frac{G^+}{Z(G)^+}$$

Zwischen den verschiedenen Normalisatorgruppen gelten die Inklusionen

$$G^+ \subset N_E(G)^+ \subset N_A(G)^+$$

$$\cap \quad \cap \quad \cap$$

$$G \subset N_E(G) \subset N_A(G)$$

(vgl. dazu die Untergruppen-Beziehungen der Automorphismengruppen in 1.3.4)

Tatsächlich erweisen sich die Normalisatorgruppen als der Schlüssel, mit dem alle Äquivalenzfragen, die im Zusammenhang mit Symmetriegruppen auftauchen, gelöst werden können.

So können die meisten Aussagen, die sich auf Automorphis-

men abstützen, so umformuliert werden, dass nur noch eine Normalisatorgruppe verwendet wird. Definiert man z.B.

"zwei Untergruppen H, K einer Symmetriegruppe heißen äquivalent, wenn es einen Automorphismus γ von G gibt, so dass gilt $\gamma(H) = K$ ",

kann man diese Definition ersetzen durch die folgende, welche gleichbedeutend ist:

"Zwei Untergruppen H, K einer Symmetriegruppe heißen äquivalent, wenn sie in $N_A(G)$ konjugiert sind".

Wir werden deshalb den Normalisatorgruppen von Symmetriegruppen einen eigenen Abschnitt widmen und dort feststellen, dass sie nicht nur abstrakte algebraische Gebilde sind, sondern auch eine sehr anschauliche Bedeutung haben.

Fassen wir noch kurz zusammen, wie wir allgemein zu einer Symmetriegruppe G die verschiedenen Automorphismengruppen berechnen können:

- Erster und wichtigster Schritt: Berechne die Gruppen $N_A(G)$ und $N_E(G)$. Wir müssen also alle Lösungen der Gleichung

$$c \cdot G \cdot c^{-1} = G, \quad c \in A \text{ resp. } E$$

finden. Diese Normalisatorgruppen sind selber von praktischer Bedeutung.

- Zweiter Schritt: Berechne die Zentralisatorgruppen $C_A(G)$, $C_E(G)$ und $Z(G)$. Das heisst, finde alle Lösungen der Gleichung

$$c \cdot g = g \cdot c \quad \text{für alle } g \in G, \quad c \in A, E \text{ resp. } G$$

Dieses Problem ist im allgemeinen viel einfacher als das erste.

- Dritter Schritt: Bilde die entsprechenden Faktorgruppen. Wenn wir Glück haben, finden wir für diese Faktorgruppen noch eine "effiziente" Darstellung (dies geht immer bei Raumgruppen, siehe § 6).

1.5 Die Normalisatorgruppen $N_A(G)$ und $N_E(G)$

Zu jeder Symmetriegruppe G haben wir im Abschnitt 1.4 die Normalisatorgruppe $N_E(G)$ definiert durch $j \in N_E(G)$, falls

$$(i) \quad j \cdot G \cdot j^{-1} = G$$

erfüllt ist. Nach dieser rein algebraischen Definition ist $N_E(G)$ eine Untergruppe von E . Tatsächlich ist aber $N_E(G)$ selber wieder eine Symmetriegruppe, da sie auch topologisch abgeschlossen ist (allgemein ist nämlich die Normalisatorgruppe einer abgeschlossenen Gruppe in einer abgeschlossenen Gruppe selber abgeschlossen). Wir werden also auch die Gruppe $N_E(G)$ nach Hermann-Mauguin-Buchmann notieren können, siehe dazu Anhang Teil C.

Assoziieren wir nun zu jedem Element g einer Symmetriegruppe G sein "Symmetrieelement" S_g (ein Begriff, der ziemlich intuitiv, aber keinesfalls vage ist. Eine formale Definition wäre aber zu aufwendig und soll deshalb hier nicht diskutiert werden). Symmetrieelemente S_g seien also etwa Inversionspunkte, Spiegelebenen, n -fache Schraubgeraden etc. Die Gruppe A aller affinen Transformationen operiert nun auf diesen Symmetrieelementen, wie sie auch auf Punkten, Ebenen und Geraden operiert. Aus (i) folgt nun

$$(ii) \quad j \text{ bildet das Symmetriegerüst von } G \text{ auf sich selber ab, insbesondere gilt } j(S_g) = S_{j \cdot g \cdot j^{-1}}.$$

Es gilt aber auch umgekehrt, dass jede Isometrie j , welche das Symmetriegerüst von G auf sich selber abbildet, ein Element von $N_E(G)$ ist. Somit haben wir eine zweite, mehr geometrische Interpretation der Gruppe $N_E(G)$ gefunden: $N_E(G)$ besteht aus all denjenigen Isometrien, welche das ganze Symmetriegerüst von G auf sich selbst abbilden. $N_E(G)$ ist die Symmetriegruppe des Symmetriegerüsts. Genau diese Gruppe nannte Hirshfeld [29] die "Cheshire" Gruppe der Symmetriegruppe G , und er tabellierte diese für die 230 Typen von dreidimensionalen Raumgruppen.

Erstellt man eine solche Tabelle, so muss man die Frage beantworten: Ist es überhaupt möglich, die in diesem § definierten Gruppen für Äquivalenzklassen von Gruppen zu berechnen, oder kann nicht der Fall auftreten, dass zwei äquivalente Symmetriegruppen nicht-äquivalente Normalisatorgruppen besitzen?

$$\begin{aligned} \text{Sei } H &= a \cdot G \cdot a^{-1} \text{ für ein } a \in A. \text{ Es ist} \\ b \in N_A(G) &\iff b \cdot G \cdot b^{-1} = G \iff b \cdot (a^{-1} \cdot H \cdot a) \cdot b^{-1} = a^{-1} \cdot H \cdot a \\ &\iff a \cdot b \cdot a^{-1} \cdot H \cdot a \cdot b^{-1} \cdot a^{-1} = H \\ &\iff a \cdot b \cdot a^{-1} \in N_A(H) \end{aligned}$$

$$\text{Also gilt} \quad N_A(H) = a \cdot N_A(G) \cdot a^{-1}$$

Die Äquivalenzklasse von $N_A(G)$ hängt also nur von der Äquivalenzklasse von G ab. Ein entsprechender Satz für die Gruppe $N_E(G)$ wäre nun allerdings falsch. Betrachten wir als einfaches Beispiel eine Raumgruppe G vom Typ P1 mit den Gitterparametern $a = b = c$ sowie $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Bei diesen speziellen Gitterparametern existieren viel mehr Isometrien j mit $j \cdot G \cdot j^{-1} = G$ als im allgemeinen Fall einer Raumgruppe vom Typ P1 ohne spezielle Werte von α , β und γ . Es ist also gar nicht möglich, die Gruppen $N_E(G)$ für Äquivalenzklassen von Symmetriegruppen anzugeben wie das Hirshfeld macht.

Eine Lösung dieses kleinen Problems findet sich im schönen Buch [39] von Schwarzenberger. Auf den Seiten 37 und 38 führt er eine Halbordnung ein auf der Menge aller Gitter von Symmetriegruppen zu einer gegebenen arithmetischen Kristallklasse. Dann zeigt er, dass immer eine Gruppe G existiert, die im folgenden Sinn minimal ist: Das Gitter jeder Gruppe H , die äquivalent ist zu G , hat *mindestens* die Symmetrie des Gitters von G . Es ist anschaulich klar, dass eine solche minimale Gruppe existiert - jede Gruppe, deren Gitterparameter nicht spezielle Werte aufweist, ist minimal in obigem Sinn. Für die Liste nehmen wir nun aus jeder Äquivalenzklasse eine solche minimale Gruppe G und führen dann ihre minimale Normalisatorgruppe $N_E(G)$ auf. Genauso machte es Hirshfeld auch in [29], und ebenso werden wir es in den Tabellen von § 9 machen. Die individuellen Fälle von höherer Symmetrie aufgrund von speziellen Werten der Gitterparameter können, wie die folgenden §§ zeigen werden, leicht behandelt werden. Ueberdies schreibt Schwarzenberger auf Seite 37 zu solchen Fällen: "Such symmetry is unstable under variation of the lattice parameters and is not physically significant".

Nun wollen wir endlich ein Beispiel einer Symmetriegruppe G und ihrer Normalisatorgruppe $N_E(G)$ anführen:

Beispiel Betrachten wir eine Symmetriegruppe G vom Typ 222. Die Gruppe $N_E(G)$ ist also diejenige Gruppe von Isometrien, welche die drei Digyren als Ganzes invariant lässt, oder anders gesagt, $N_E(G)$ ist die Symmetriegruppe eines Gebildes, das aus drei sich orthogonal in einem Punkt schneidenden Geraden besteht. Offenbar ist $N_E(G)$ vom Typ $m3m$, wobei die vier Tetragyren mit den Digyren in G zusammenfallen.

Wie in diesem Beispiel kann man die Gruppe $N_E(G)$ einer Symmetriegruppe oft direkt "sehen", indem man sich das Symmetriegerüst von G "gründlich anschaut".

Die Gruppe $N_A(G)$ enthält ganz analog all diejenigen affinen Transformationen oder "linearen Verzerrungen" des Raumes, welche das Symmetriegerüst von G auf sich abbilden. Raumrichtungen, die nur quantitativ-metrisch ungleichwertig sind, aber qualitativ (Art der Symmetrieelemente) dieselben Elemente enthalten, können durch affine Transformationen ineinander übergeführt werden.

Beispiel Wir betrachten eine Raumgruppe G vom Typ P222. $N_E(G)$ ist die Gruppe aller Isometrien, welche das Symmetriegerüst von G auf sich selbst abbilden, und man sieht schnell, dass gilt $N_E(G) = D_2 D_2 D_2 \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ (betrachte das Symmetriegerüst von P222 auf der Seite 102 der Int. Tables Vol. I!). Fragen wir nun nach der affinen Symmetrie des Symmetriegerüsts, also nach $N_A(P222)$, so spielen die ungleichen Gitterkonstanten a, b, c keine Rolle mehr, und die Punktsymmetrie wird affin kubisch *): $N_A(G) = D_2 D_2 D_2 'm3m'$. Abgesehen von der Metrik können wir also die drei Hauptblickrichtungen nicht unterscheiden. Anders liegt der Fall bei einer Raumgruppe vom Typ $P222_1$, wo sich eine Hauptachse qualitativ von den andern beiden unterscheidet.

Zu den Gruppen $N_E(G)$ und $N_A(G)$ können wir noch einen andern Zugang finden. Dazu nehmen wir an, es seien für jede Symmetriegruppe G gewisse Konventionen vorhanden, um ein affines Bezugssystem $O, \vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ (in dreidim. Fall) zu wählen. Zwei solche Wahlen bestimmen eine affine Transformation, welche das erste Dreibein ins zweite überführt, und umgekehrt liefert jede affine Transformation a zu jedem Bezugssystem ein neues.

*) Präzisierung dieser Sprechweise und der Notation auf S. 57

Sind nun die Konventionen gut getroffen, so unterscheiden sich zwei Standard-Bezugssysteme immer gerade um eine Transformation in $N_A(G)$, und umgekehrt erhalten wir aus jeder konventionellen Basis alle andern konventionellen "Aufstellungen" durch Transformation mit den Elementen aus $N_A(G)$.

$N_A(G)$ ist also die Gruppe aller affinen Transformationen, welche eine konventionelle Basis in eine andere überführen.

$N_A(G)$ beschreibt damit die Willkür in der Wahl der konventionellen Elementarzelle oder der affinen Basis. Entsprechend enthält $N_E(G)$ alle Isometrien, welche eine konventionelle Basis in eine ebensolche überführen.

Es ist klar, dass auf diesem Weg keine brauchbare Definition der Gruppen $N_A(G)$ und $N_E(G)$ gefunden werden kann, immerhin können umgekehrt die Konventionen über die Wahl der Elementarzellen diskutiert werden, wenn die Gruppen $N_A(G)$ und $N_E(G)$ bekannt sind (vgl. dazu Burzlaff/Zimmermann [16] sowie § 5 dieser Arbeit!).

Die Normalisatorgruppen von Symmetriegruppen, wie sie in Abschnitt 1.4 definiert werden, sind also gar nicht so abstrakt und neu, wie es vielleicht zuerst scheint, und auch der praktische Kristallograph braucht sie, wenn er präzise von Äquivalenzfragen (z.B. eben von äquivalenten Aufstellungen) im Zusammenhang mit Symmetriegruppen sprechen will.

Wir möchten diesen Abschnitt und damit den ganzen § mit einem Beispiel abschliessen, in welchem eine nicht-kristallographische und nicht-diskrete Symmetriegruppe G und ihre Normalisatorgruppen $N_E(G)$ und $N_A(G)$ beschrieben werden.

Beispiel

G sei die Symmetriegruppe eines unendlich ausgedehnten Wellbleches:

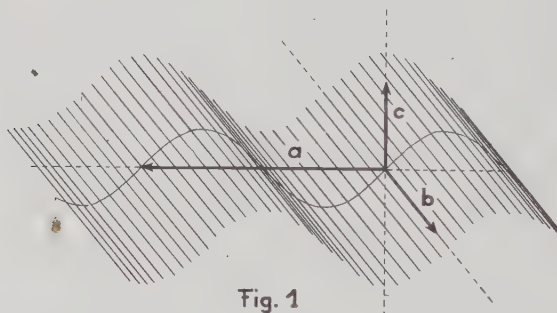


Fig. 1

Wählen wir die Aufstellung wie in der Zeichnung, so ist das Symbol von G $DKO \begin{smallmatrix} 2 & 1 & 2 \\ m & m & a \end{smallmatrix}$ (vgl. Anhang Teil C₄).

G ist also eine nicht-diskrete orthorhombische Gruppe. Die Elementar"zelle" von G ist ein unendlich hoher Streifen der Breite $|a|$ in der $\vec{a}$ - $\vec{c}$ -Ebene. Fig. 2 zeigt die Projektion dieser Elementarzelle und des Symmetrierüsts von G längs der $\vec{c}$ -Richtung:

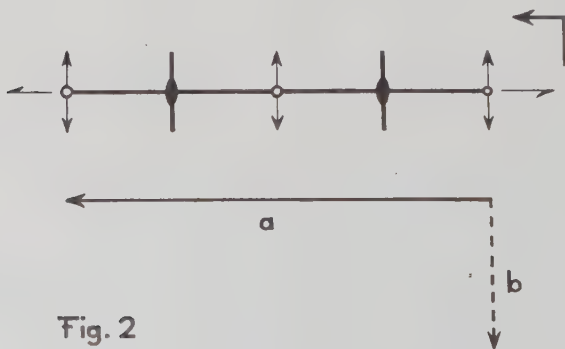


Fig. 2

Die Cheshire - Gruppe $N_E(G)$ ist offensichtlich die Gruppe $D_2KO \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$, und wir können sofort eine Matrix - Darstellung von $N_E(G)$ geben:

$$N_E(G) \cong \left\{ \left[\begin{array}{ccc|c} & & & p \\ & M & & q \\ & & & o \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \mid M \in \left[\begin{array}{ccc} 222 \\ mmm \end{array} \right], p \in \frac{1}{2} \cdot \mathbb{Z}, q \in \mathbb{R} \right\}$$

Auch affin sind die drei Richtungen $\vec{a}$, $\vec{b}$ und $\vec{c}$ nicht äquivalent, sind sie doch qualitativ verschieden: $\vec{a}$ liegt in der Richtung der Gleitkomponente der Gleitspiegelebene, $\vec{b}$ ist die kontinuierliche Translationsrichtung, während $\vec{c}$ senkrecht steht auf $\vec{a}$ und $\vec{b}$ und keine Translation aufweist. Also wird auch die affine Punktgruppe von $N_A(G)$ orthorhombisch sein (d.h. sie ist 1-1-1- reduzierbar oder diagonalisierbar). Allerdings können in der $\vec{b}$ - und $\vec{c}$ -Richtung beliebige Streckungsfaktoren $\neq 0$ auftreten. Es ist also

$$N_A(G) \cong \left\{ \left[\begin{array}{cccc} \alpha & 0 & 0 & p \\ 0 & \beta & 0 & q \\ 0 & 0 & \gamma & o \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \mid \alpha = \pm 1, \beta \neq 0, \gamma \neq 0, p \in \frac{1}{2} \cdot \mathbb{Z}, q \in \mathbb{R} \right\}$$

Dieses Beispiel soll insbesondere zeigen, dass alles, was wir in diesem § angeführt haben, für beliebige Symmetriegruppen G von $\text{Iso}(n)$ gilt. Die Ausführungen sind nicht an eine bestimmte Dimension n des affinen Raumes gebunden. Auch im folgenden werden ausschliesslich Methoden benützt, die allgemeine Gültigkeit haben, obwohl wir dann speziell die Resultate für die dreidimensionalen Punkt- und Raumgruppen herleiten wollen.

§ 2

Punktgruppen

2.1 Punktgruppen oder Symmetriegruppen mit Fixpunkt ?

Zuallererst müssen wir einmal betonen, dass die Punktgruppen im üblichen Sinn gar keine Symmetriegruppen sind, wie wir sie in § 1 definiert haben. Es handelt sich bei ihnen ja gar nicht um Transformationsgruppen des *affinen Raumes*, sondern um solche des *Vektorraumes*, der dem *affinen Raum* zugrunde liegt. Die Elemente der Punktgruppen werden dementsprechend auch durch $n \times n$ -Matrizen beschrieben, während wir ja Transformationen des n -dimensionalen *affinen Raumes* mit speziellen $(n+1) \times (n+1)$ -Matrizen beschreiben. Es ist unumgänglich, *Punktgruppen* als Transformationsgruppen des *Vektorraumes* einerseits und *Symmetriegruppen mit Fixpunkt* als spezielle Symmetriegruppen des *affinen Raumes* klar auseinanderzuhalten. Nur Symmetriegruppen mit Fixpunkt sind Objekte von $\text{Iso}(n)$, nicht aber die Punktgruppen (welche ja nicht einmal topologisch abgeschlossen zu sein brauchen, vgl. 1.1). Die Kristallographen brauchen tatsächlich beide Konzepte: Mit Punktgruppen werden die Symmetrien von Translationsgittern und von endlichen Kristallen beschrieben, wogegen die Lagesymmetriegruppen in einer Kristallstruktur durch Symmetriegruppen mit Fixpunkt beschrieben werden.

Unsere Notation, wie sie im Anhang Teil C erklärt wird, erlaubt es uns, die beiden Begriffe deutlich auseinanderzuhalten: Symmetriegruppen mit Fixpunkt weisen ja insbesondere keine Translationen auf, ihr Hermann-Mauguin-Buchmann-Symbol beginnt also mit n (= Dimensionszahl) Buchstaben O . Dahinter folgt dann das übliche Punktgruppensymbol. Punktgruppen werden dagegen wie üblich ohne diese Grossbuchstaben notiert.

Selbstverständlich sind nun aber die beiden Begriffe durch enge Beziehungen miteinander verknüpft: Diese werden durch die Abbildung " $\sim$ " von A_n auf $GL(\vec{R}_n)$ hergestellt. Für die Definition von $\sim$ führen wir eine Basis $v_1, v_2, \dots, v_n$ des Vektorraumes $\vec{R}_n$ ein und wählen zusätzlich einen Punkt O des affinen Raumes R_n . Die Abbildung

$$\sim : A_n \longrightarrow GL(\vec{R}_n)$$

wird dann durch die folgende Abbildungsvorschrift für die Darstellungsmatrizen wohldefiniert:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} & t_1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} & t_n \\ 0 & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{\sim} \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

Die Wahl einer anderen affinen Basis liefert zwar andere Darstellungsmatrizen für die Abbildungen, die Definition von $\sim$ bleibt aber dieselbe. Offenbar liefert jede Wahl eines Punktes O im affinen Raum eine Darstellung von A_n als semidirektes Produkt von $GL(\vec{R}_n)$ mit $\vec{R}_n$:

$$\begin{array}{ccc} D_O : A_n & \longrightarrow & GL(\vec{R}_n) \rtimes R_n \\ A & \longmapsto & (A, a) \end{array}$$

$A = \sim(A)$ heisst der *rotative Anteil* von A und ist von der Wahl des Punktes O unabhängig. a heisst der *translative Anteil* von A und hängt von der Wahl von O ab. Diese Darstellung der affinen Transformationen wird in der Literatur und auch in dieser Arbeit weitaus am häufigsten verwendet.

Die Abbildung

$$\begin{array}{ccc} I_O : GL(\vec{R}_n) & \longrightarrow & A_n \\ A & \longmapsto & (A, 0) \end{array}$$

ist ein Schnitt zur obigen Darstellung von A_n als semidirektes Produkt. I_O ist ein Gruppenisomorphismus von $GL(\vec{R}_n)$ auf die Untergruppe aller affinen Transformationen in A_n , welche den Punkt O fix lassen.

Betrachtet man die Definition von $\sim$ über die Darstellungsmatrizen, so ist offensichtlich, dass man die Abbildung $\sim$ als Projektion auffassen kann (eines $n \times (n+1)$ - dimensionalen Vektorraumes auf einen $n \times n$ - dimensionalen). $\sim$ ist aber auch ein surjektiver Gruppenhomomorphismus, und überdies ist $\sim$ eine stetige Abbildung (der Kern von $\sim$, nämlich die Gruppe aller Translationen in A_n , bildet also eine abgeschlossene Untergruppe von A_n).

Ueber die Abbildung $\sim$ können wir alle Resultate etwa über die Normalisatorgruppen von Punktgruppen in $GL(\bar{R}_n)$ aus den entsprechenden Resultaten von den Symmetriegruppen mit Fixpunkt ableiten. Die Umkehrung dieses Satzes wäre aber falsch, bei der Abbildung $\sim$ handelt es sich um eine echte Projektion mit einem entsprechenden Informationsverlust. Das folgende Beispiel soll das zeigen (vgl. dazu aber auch Lemma 1 auf Seite 28):

Beispiel 1 Wir betrachten eine Symmetriegruppe G vom Typ 000 611 . Fixpunkte von G sind alle Punkte auf der sechszähligen Drehachse. Es ist

$$C_E(G) = \text{OOK } \frac{2}{m}11 \quad \text{und} \quad N_E(G) = \text{OOK } \frac{2}{mmm}22$$

Für die Punktgruppe $\tilde{G}$ vom Typ 611 haben wir

$$C_{O_3}(R)(\tilde{G}) = \frac{2}{m}11 \quad , \quad N_{O_3}(R)(\tilde{G}) = \frac{2}{mmm}22$$

Die Translationsgruppe in $N_E(G)$ und $C_E(G)$ geht bei der Projektion verloren. Die Resultate von $\tilde{G}$ sind aus denjenigen für G ableitbar, nicht aber umgekehrt.

Betrachtet man aber etwa Automorphismengruppen, so ist es nicht mehr sinnvoll, Punktgruppen und Symmetriegruppen mit Fixpunkt zu unterscheiden (siehe § 3). Nachdem wir diesen Unterschied mit einigem Aufwand herausgearbeitet haben, werden wir nicht mehr immer pedantisch unterscheiden und vielleicht auch einmal von den "Punktgruppen in Krist(3)" sprechen.

2.2 Zur Berechnung der Gruppen $N_A(G)$

Unser Problem ist das folgende: Eine Symmetriegruppe G mit Fixpunkt P ist gegeben, und wir müssen die Menge aller affinen Transformationen (A, a) finden, für die gilt

$$(A, a) \cdot G \cdot (A, a)^{-1} = G \quad (1)$$

Wir wählen ein günstiges Koordinatensystem mit Ursprung im Fixpunkt P möglichst so, dass die Punkttransformationen in G einfache Matrix-Gestalt erhalten (Standard-Basisssystem!). So erhalten wir aus (1) die Matrixbeziehung

$$\begin{bmatrix} a & b & c & k \\ d & e & f & l \\ g & h & i & m \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot [G] = [G] \cdot \begin{bmatrix} a & b & c & k \\ d & e & f & l \\ g & h & i & m \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2)$$

Aus (2) holen wir sukzessive so viele Einschränkungen an eine allgemeine Matrix M heraus, bis wir zeigen können, dass diese notwendigen Bedingungen an M auch hinreichend sind dafür, dass M im Normalisator von $[G]$ liegt. Dabei ist es vorteilhaft, bei den "kleinen" Gruppen zu beginnen, weil man diese Informationen dann bei der Lösung von (2) für grössere Gruppen benutzen kann.

Beispiel 2 $G = 000 \ 112$. Für eine Standard-Basis haben wir

$$[G] = \left\{ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right\} = \{1, 2\}$$

$M \cdot 2G \cdot M^{-1}$ soll wieder in $[G]$ liegen. Es kommt dafür einzig $2G$ in Frage, da ja die Normalform einer Transformation bei der Konjugation erhalten bleibt. (2) liefert also einmal die Gleichung

$$\begin{bmatrix} a & b & c & k \\ d & e & f & l \\ g & h & i & m \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a & b & c & k \\ d & e & f & l \\ g & h & i & m \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Rechnet man das aus, erhält man die Gleichungen

$$-a=-a, -b=-b, c=-c, -d=-d, -e=-e, f=-f, -g=g,$$

$$-h=h, i=i, k=-k, \ell=-\ell, m=m$$

Die Koeffizienten c, f, g, h, k und ℓ von M müssen also den Wert 0 annehmen. Damit haben wir aber (2) schon ausgeschöpft, denn die Einheitsmatrix liefert keine weitere Einschränkung an M . Unsere Bedingungen an M sind offenbar auch hinreichend, und wir haben

$$N_A(G) = \left\{ \begin{bmatrix} a & b & 0 & 0 \\ d & e & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & m \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \mid a, b, d, e, i, m \in \mathbb{R}, \det \neq 0 \right\}$$

Es gibt nun einige Überlegungen, die die allgemeine Lösung von (2) beschleunigen. Besitzt die betrachtete Symmetriegruppe mit Fixpunkt *genau einen* Fixpunkt, so kann man zum Vorneherein sagen, dass die Koeffizienten k, ℓ und m in M gleich 0 sein müssen, da translative Anteile verschieden von 0 einen Fixpunkt in einen anderen überführen. Gruppen mit genau einem Fixpunkt erkennen wir sofort, wenn wir ihr Symmetrierüst betrachten. Sobald ein Punkt ausgezeichnet ist (Inversionszentrum, Drehinversionszentrum, Schnittpunkt von Achsen), kann es sich nur um *den* Fixpunkt handeln.

Im weiteren können wir Resultate über kleine Gruppen verwenden, um diejenigen der grossen herzuleiten: Besitzt eine Gruppe G eine Untergruppe H , welche durch alle Automorphismen von G auf sich selbst abgebildet wird (z.B. 4 in 422), so gilt sicher $N_A(G) \subset N_A(H)$, da $a \cdot G \cdot a^{-1} = G$ in einem solchen Fall $a \cdot H \cdot a^{-1} = H$ impliziert. (Solche Untergruppen heissen *charakteristisch*, ausführlicher werden wir darauf in Abschnitt 4.3 und vor allem in § 7 zu sprechen kommen.)

Beispiel 3 Hat man $N_A(000 \ 113)$ und $N_A(000 \ 11m)$ bereits ausgerechnet, erhalten wir für $N_A(000 \ 11\frac{6}{m})$ die Abschätzung (in einer orthogonalen Basis !):

$$N_A(000 \ 11\frac{6}{m}) \subset \left[N_A(000 \ 113) \cap N_A(000 \ 11m) \right] \cong$$

$$\cong \left\{ \begin{bmatrix} a & b & 0 & 0 \\ -b & a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \mid \text{oder} \begin{bmatrix} a & b & 0 & 0 \\ b & -a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \mid \det \neq 0 \right\} \cap \left\{ \begin{bmatrix} a & b & 0 & k \\ d & e & 0 & l \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \mid \det \neq 0 \right\} =$$

$$= \left\{ \begin{bmatrix} a & b & 0 & 0 \\ -b & a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \mid \text{oder} \begin{bmatrix} a & b & 0 & 0 \\ b & -a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \mid \det \neq 0 \right\}$$

Man rechnet sich nun leicht aus, dass für Matrizen M dieser Gestalt auch gilt $M \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot M^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$, und wir haben damit $N_A(\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix})$ bereits berechnet.

Dergestalt kann man in kurzer Zeit alle Gruppen $N_A(G)$ von dreidimensionalen Symmetriegruppen G mit Fixpunkt ausrechnen. Allerdings kommt kaum etwas Ueberraschendes dabei heraus, da man die Resultate mit den Ueberlegungen von Abschnitt 1.5 direkt angeben kann: $N_A(G)$ ist ja die affine Transformationsgruppe, welche das Symmetriegerüst von G in sich überführt. Das Resultat von Beispiel 2 etwa hätten wir so sofort anschreiben können. Wir wollen uns später aber nicht auf die Inspektion des Symmetriegerüsts abstützen und benötigen daher neben dieser "anschaulichen" Methode noch eine Berechnungsmöglichkeit.

Wir sollten noch erwähnen, dass die Gruppe $N_A(G)$ von Symmetriegruppen mit Fixpunkt über ihrer Translationsgruppe immer in ein semidirektes Produkt zerfällt:

Lemma 1 Sei G eine Symmetriegruppe mit Fixpunkt. Dann ist

$$N_A(G) \cong N_A(\tilde{G}) \rtimes C(\tilde{G})$$

wo $C(\tilde{G}) \stackrel{\text{def}}{=} \{ \text{Translationen } t \mid S(t) = t \text{ für alle } S \in \tilde{G} \}$

Beweis Wir wählen eine Basis so, dass gilt
 $G = \{(S, 0) \mid S \in \tilde{G}\}$. Für jedes $(S, s) \in N_A(G)$ gilt dann
 $(S, s) \cdot (R, 0) \cdot (S, s)^{-1} \in G$ für alle $R \in \tilde{G}$. Also ist
 $S \cdot R \cdot S^{-1} \in \tilde{G}$ für alle $R \in \tilde{G}$, somit $S \in N_A(\tilde{G})$.
Umgekehrt gilt für jedes $S \in N_A(\tilde{G})$
 $(S, 0) \cdot (R, 0) \cdot (S, 0)^{-1} \in G$ für alle $(R, 0) \in G$. Es ist
also $\widehat{N_A(G)} = N_A(\tilde{G})$.
Mit (S, s) ist also auch $(S, 0)$ in $N_A(G)$. $N_A(G)$ zerfällt
demnach über seiner Translationsgruppe Γ_N in ein
semidirektes Produkt. Wir müssen noch zeigen, dass
gilt $\Gamma_N = C(\tilde{G})$. Es ist aber
 $(1, t) \in \Gamma_N \iff (1, t) \cdot (S, 0) \cdot (1, -t) \in G \text{ für } (S, 0) \in G$
 $\iff (S, t + S(-t)) \in G \text{ für alle } (S, 0) \in G$
 $\iff t + S(t) = 0 \text{ für alle } S \in \tilde{G}$
 $\iff S(t) = t \text{ für alle } S \in \tilde{G}$ □

Kennt man also irgendwoher die Normalisatorgruppen der Punktgruppen in $GL(\tilde{R}_n)$, so liefern diese zusammen mit den Gruppen $C(\tilde{G})$ (die der Tabelle im § 5 entnommen werden können) schon die affinen Normalisatorgruppen der Symmetriegruppen mit Fixpunkt.

Ein entsprechender Satz für beliebige Symmetriegruppen wäre falsch: $N_A(G)$ braucht über seiner Translationsgruppe nicht in ein semidirektes Produkt zu zerfallen. Die Tabelle 9.2 über die Normalisatorgruppen von Raumgruppen enthält diverse Gegenbeispiele dazu. So ist etwa die Normalisatorgruppe einer Raumgruppe vom Typ $P3_121$ selber eine Raumgruppe vom Typ $P6_222$ und zerfällt über ihrer Translationsgruppe also nicht in ein semidirektes Produkt.

In der Tabelle 8.1 wird für jede Symmetriegruppe G mit Fixpunkt aus $\text{Iso}(3)$ eine Beschreibung von $N_A(G)$ gegeben, sei es durch eine Matrixgruppe bezüglich einer bestimmten Basis oder durch eine gruppentheoretische Beschreibung unter Verwendung der Hermann-Mauguin-Buchmann-Symbole, oder durch beides.

2.3 Die Ableitung der übrigen Normalisatorgruppen

Nachdem man für Symmetriegruppen G mit Fixpunkt die Gruppen $N_A(G)$ einmal abgeleitet hat, ist es einfach, auch die anderen Normalisatorgruppen als Untergruppen von $N_A(G)$ zu finden.

Es gilt ja

$$N_E(G) = N_A(G) \cap E$$

$$N_A^+(G) = \{A \in N_A(G) \mid \det(A) > 0\}$$

$$N_E^+(G) = \{A \in N_E(G) \mid \det(A) = +1\}$$

$N_E(G)$ beispielsweise, also die Cheshire-Gruppe von G , ist demnach die grösste Symmetriegruppe, welche in $N_A(G)$ enthalten ist. Die Gruppen in $\text{Iso}(3)$ kennen wir aber gut. Wieder kann man als Kontrolle benützen, dass $N_E(G)$ die Symmetriegruppe des Symmetriegerüsts ist. Der Uebergang von einer Transformationsgruppe H zur Untergruppe H^+ aller Transformationen mit positiver Determinante braucht keine Erläuterung.

Beispiele:

G	$N_A(G)$	$N_E(G)$	$N_E^+(G)$
000 1	A_3	$E_3 = KKK \frac{\infty\infty}{mmm}$	$KKK \infty\infty$
000 11m	volle aff. Schichtgr.	$KKO \frac{22\infty}{mmm}$	$KKO 22\infty$
000 $\bar{n}11$	$R^+ \times \frac{\infty 22}{mmm} \times R^+$	$OOO \frac{\infty 22}{mmm}$	$OOO \infty 22$
000 nmm	$R^+ \times OOK \frac{nm 22}{mmm} \times R^+$	$OOK \frac{nm 22}{mmm}$	$OOK n+nmm$
000 432	$R^+ \times OOO m3m$	$OOO m3m$	$OOO 432$

Die vollständigen Resultate für die dreidimensionalen Symmetriegruppen mit Fixpunkt finden sich in der Tabelle 8.2

2.4 Ableitung der Zentralisatorgruppen

Die Zentralisatorgruppen $C_A(G)$, $C_A^+(G)$, $C_E(G)$ und $C_E^+(G)$ können wir aus den entsprechenden Normalisatorgruppen ableiten. Wir müssen uns jeweils überlegen, welche der G normalisierenden Elemente mit ganz G kommutieren:

$$C_X(G) = \{a \in N_X(G) \mid a \cdot g = g \cdot a \text{ für alle } g \in G\}$$

Mit einigem elementarem Wissen über die Gruppen $GL_3(\mathbb{R})$ resp. $O_3(\mathbb{R})$ können wir diese Frage meist leicht beantworten. Nur bei den monoklinen und orthorhombischen Gruppen G ist weder die Gruppe G noch ihre Normalisatorgruppe leicht handzuhaben. In diesen, aber auch in allen anderen Fällen, können wir das Problem von Grund auf lösen, indem wir das Gleichungssystem

$$(A,a) \cdot (S,s) = (S,s) \cdot (A,a) \quad \text{für alle } (S,s) \text{ in } G \quad (3)$$

lösen. (3) liefert via Basiswahl direkt einen Satz von linearen Gleichungen für die Koeffizienten einer allgemeinen Matrix M :

$$\begin{bmatrix} a & b & c & k \\ d & e & f & l \\ g & h & i & m \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot [S,s] = [S,s] \cdot \begin{bmatrix} a & b & c & k \\ d & e & f & l \\ g & h & i & m \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4)$$

für alle (S,s) in G

Die Lösung von (4) liefert uns eine Matrixbeschreibung der Gruppe $C_A(G)$. Es ist dann

$$C_E(G) = C_A(G) \cap E, \quad C_A^+(G) = C_A(G) \cap A^+ \quad \text{und}$$

$$C_E^+(G) = C_A(G) \cap E^+ = C_E(G) \cap E^+$$

und wir erhalten die restlichen gesuchten Gruppen ähnlich wie in 2.3.

Beispiele (Fortsetzung der Beispiele in 2.3)

G	$C_A(G)$	$C_E(G)$	$C_E^+(G)$
000 1	$C_A(G) = N_A(G) = A_3$	E_3	E_3^+
000 11m	$C_A(G) = N_A(G)$, daher $C_E(G) = N_E(G)$ etc.		
000 $\bar{n}11$	$R^+ \times 000 \frac{\infty}{m} 11 \times R^+$	$000 \frac{\infty}{m} 11$	$000 \infty 11$
000 nmm	$R^+ \times 00K \frac{2}{m} 11 \times R^+$	$00K \frac{2}{m} 11$	$00K 211$
000 432	$R^+ \times 000 \bar{1}$	$000 \bar{1}$	$000 1$

Allgemein gilt die Faustregel: Je grösser G ist, desto grösser ist auch der Index der Zentralisatorgruppe in der entsprechenden Normalisatorgruppe, d.h. je grösser G ist, desto grösser ist auch die Faktorgruppe $N(G) / C(G)$, welche einer Automorphismengruppe von G isomorph ist. Unsere Faustregel entspricht also der nicht überraschenden Tatsache, dass grössere, kompliziertere Gruppen i.A. auch mehr Automorphismen aufweisen.

Die Gruppen $C_E(G)$ und $C_E^+(G)$ von dreidimensionalen Symmetriegruppen mit Fixpunkt sind in der Tabelle 8.2 zusammen mit $N_E(G)$ und $N_E^+(G)$ aufgeführt, während die $C_A(G)$ (und damit implizite auch die $C_A^+(G)$) zusammen mit den $N_A(G)$ der Tabelle 8.1 entnommen werden können.

2.5 Die Zentren und Kommutatorgruppen der Punktgruppen

Die Berechnung des *Zentrums* einer Symmetriegruppe G mit Fixpunkt spielt sich völlig innerhalb von G ab, und wir können uns deshalb auf die Betrachtung der isomorphen Punktgruppe $\tilde{G}$ beschränken. In diesem Abschnitt werden wir also nur von Punktgruppen sprechen und G, H usw. werden auch solche bezeichnen.

Die Zentren der dreidimensionalen Punktgruppen sind sicher schon seit Urzeiten bekannt. Tatsächlich trifft man aber kaum je eine Liste an. Wir brauchen die Gruppen $Z(G)$ und $Z(G)^+$ aber, wenn wir die Automorphismengruppen $\text{Int}(G)$ und $\text{Int}^+(G)$ von Punktgruppen (und Symmetriegruppen mit Fixpunkt) auf analoge Art wie die anderen Automorphismengruppen berechnen wollen. Im übrigen ist das Zentrum eine interessante, da charakteristische Untergruppe jeder Gruppe und daher an sich schon berechnungswürdig. Zudem ist das Zentrum einer Gruppe auch ein gewisses Mass der "Kommutativität" der Gruppe. Es ist klar, dass gilt

$$G \text{ kommutativ} \iff G = Z(G)$$

Allgemeiner gilt die Faustregel: Je "kommutativer" G ist, desto kleiner ist der Index von $Z(G)$ in G . Wir geben die Gruppen $Z(G)$ und $Z(G)^+$ der Punktgruppen einfach an in der Tabelle 8.3. Interessant ist vielleicht noch, sich davon zu überzeugen, dass das Zentrum einer Symmetriegruppe schon gruppentheoretisch festliegt, und "abstrakt isomorphe" Symmetriegruppen auch "abstrakt isomorphe" Zentren aufweisen müssen:

Beispiel $622 \cong 6mm \cong \bar{6}m2 \cong D_6$ ($\cong$ als Gruppen)
daher auch
 $Z(622) \cong Z(6mm) \cong Z(\bar{6}m2) \cong C_2$
aber $Z(622) = 6^3 = 2_Z = Z(6mm)$
und $Z(\bar{6}m2) = \bar{6}^3 = m_Z$!

Wenn wir die Gruppen $Z(G)$ und $Z(G)^+$ ableiten möchten aus dem, was wir nun schon über Punktgruppen und Symmetriegruppen mit Fixpunkt wissen, so können wir die folgenden Beziehungen benutzen:

$$Z(G) = C_E(G) \cap G$$

$$Z(G)^+ = C_E^+(G) \cap G = C_E(G) \cap G^+ = [Z(G)]^+$$

Wir wollen hier noch eine weitere charakteristische Untergruppe von Punktgruppen oder Symmetriegruppen mit Fixpunkt betrachten, die sogenannte *Kommutatorgruppe*. Wir werden im § 7 wieder auf diese Gruppe zurückkommen. Wir behandeln sie hier, weil sie in gewissem Sinn komplementär ist zum Zentrum der Gruppe. Zuerst die Definition:

Definition Sei G eine beliebige Gruppe. Wir bilden zu G die Menge $M = \{g \cdot h \cdot g^{-1} \cdot h^{-1} \mid g, h \text{ in } G\}$ aller "Kommutatoren" von Elementen aus G . Die von M erzeugte Untergruppe von G heisst die Kommutatorgruppe von G .

Bemerkungen:

- * Im Allgemeinen bildet die Menge M der Kommutatoren einer Gruppe noch keine Untergruppe. Insbesondere braucht das Produkt zweier Kommutatoren selber kein Kommutator zu sein, d.h. braucht also nicht in der Gestalt $a \cdot b \cdot a^{-1} \cdot b^{-1}$ darstellbar zu sein.
- * Die von M erzeugte Untergruppe ist normal und sogar charakteristisch in G , da ein Kommutator sowohl durch innere als auch durch äussere Automorphismen von G auf einen Kommutator abgebildet wird. Die Menge M ist also invariant gegen Automorphismen von G , damit aber auch ihr Erzeugnis.
- * Ist G kommutativ, so gilt für alle Elemente g und h : $g \cdot h \cdot g^{-1} \cdot h^{-1} = 1_G$, die Kommutatorgruppe von G ist also trivial. Je kommutativer eine Gruppe ist, desto kleiner ist ihre Kommutatorgruppe und desto grösser ist, wie wir wissen, ihr Zentrum. In diesem Sinne sind Zentrum und Kommutatorgruppe zwei komplementäre Masse für die Kommutativität einer Gruppe.
- * Die Kommutatorgruppe einer Transformationsgruppe F ist immer eine Untergruppe von F^+ wegen der Produktregel für Determinanten.

Die Kommutatorgruppe einer Gruppe G wird oft auch die *abgeleitete Gruppe* oder *erste Ableitung* von G genannt und mit G' bezeichnet. Man kann dann auch die abgeleitete Gruppe zu G' , also G'' , betrachten usw. Bei den dreidimensionalen kristallographischen Punktgruppen ist aber ausser bei einigen kubischen Gruppen schon $G' = G'' = G^{(n)} = \{1_G\}$. Die Ableitungen brauchen aber keineswegs bis auf $\{1_G\}$ zu schrumpfen. So ist für $G = 532$ bereits $G' = G$ und damit auch $G^{(n)} = G$.

Beispiele

G	222	4mm	$\frac{422}{mmm}$	32	$\bar{3}\frac{2}{m}$	622	23	$\bar{4}3m$	m3m	532
$Z(G)$	222	2_z	$\frac{2}{m}\bar{1}1$	1	$\bar{1}$	2_z	1	1	$\bar{1}$	1
G'	1	2_z	2_z	3	3	3	222	23	23	532

Die vollständigen Resultate für die dreidimensionalen Punktgruppen finden sich ebenfalls in der Tabelle 8.3.

§ 3 Automorphismengruppen von Punktgruppen

3.1 Die Ableitung der Automorphismengruppen

Der Abschnitt 1.4 gibt uns genau Auskunft darüber, wie wir die verschiedenen Automorphismengruppen einer Symmetriegruppe aus deren Normalisator- und Zentralisatorgruppen ableiten können. Wir haben

$$\begin{aligned} \text{Int}(G) &\cong \frac{G}{Z(G)} , & \text{Iso Aut}(G) &\cong \frac{N_E(G)}{C_E(G)} , & \text{Aut}(G) &\cong \frac{N_A(G)}{C_A(G)} \\ \text{Int}^+(G) &\cong \frac{G^+}{Z(G)^+} , & \text{Iso Aut}^+(G) &\cong \frac{N_E^+(G)}{C_E^+(G)} , & \text{Aut}^+(G) &\cong \frac{N_A^+(G)}{C_A^+(G)} \end{aligned}$$

Betrachten wir die Tabellen 8.1 und 8.2, so stellen wir fest, dass bei Symmetriegruppen mit Fixpunkt die Untergruppe der Translationen der Zentralisatorgruppe immer mit derjenigen der entsprechenden Normalisatorgruppe übereinstimmt. Dass dies so sein muss, zeigt das folgende Lemma.

Lemma 1 Sei G eine Symmetriegruppe mit Fixpunkt, t eine Translation und es gelte $t \cdot G \cdot t^{-1} = G$.
Dann kommutiert t mit allen Elementen von G .

Beweis: $t \cdot G \cdot t^{-1} = G \Rightarrow t \cdot G = G \cdot t \Rightarrow$
 $(1, t) \cdot \{(S, 0) \mid S \in \tilde{G}\} = \{(S, 0) \mid S \in \tilde{G}\} \cdot (1, t) \Rightarrow$
 $\{(S, t) \mid S \in \tilde{G}\} = \{(S, S(t)) \mid S \in \tilde{G}\}$
 Jedes $S \in \tilde{G}$ hat aber genau einen Vertreter (S, s) in G , also gilt $(S, t) = (S, S(t))$ für alle S in $\tilde{G}$.
 Somit $(1, t) \cdot (S, 0) = (S, 0) \cdot (1, t)$ für alle $(S, 0) \in G$.

In unseren Faktorgruppendarstellungen der Automorphismengruppen "kürzen" sich die Translationen immer weg.

Beispiel 1

$$\text{Iso Aut}(\text{OOO mm}^2) \cong \frac{\text{OO}\cancel{\text{K}}}{\text{OO}\cancel{\text{K}}} \frac{\begin{smallmatrix} 4 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{smallmatrix}}{\begin{smallmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{smallmatrix}} = \frac{\text{OOO}}{\text{OOO}} \frac{\begin{smallmatrix} 4 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{smallmatrix}}{\begin{smallmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{smallmatrix}} \cong$$

$$\cong \frac{\begin{smallmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{smallmatrix}}{\begin{smallmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{smallmatrix}} \left[= \frac{422}{222} \times \frac{1}{1} \cong \frac{422}{222} \right]$$

Führen wir also in den Tabellen 8.1 und 8.2 überall die Projektion $\sim$ von Abschnitt 2.1 durch. Wir erhalten dann Tabellen der Normalisatorgruppen und Zentralisatorgruppen der dreidimensionalen Punktgruppen in $\tilde{A} = GL(\vec{R}_3)$, $\tilde{A}^+ = GL^+(\vec{R}_3)$, $\tilde{E} = O(\vec{R}_3)$ resp. $\tilde{E}^+ = O^+(\vec{R}_3)$. An diesen Tabellen fallen die folgenden Regelmässigkeiten auf:

- daher

$$\frac{N_{\text{A}}^{\text{+}}(\text{G})}{C_{\text{A}}^{\text{+}}(\text{G})} = \frac{N_{\text{A}}^{\text{+}}(\text{G}) \times \cancel{\frac{1}{C_{\text{A}}^{\text{+}}(\text{G})}}}{C_{\text{A}}^{\text{+}}(\text{G}) \times \cancel{\frac{1}{C_{\text{A}}^{\text{+}}(\text{G})}}} \approx \frac{N_{\text{A}}^{\text{+}}(\text{G})}{C_{\text{A}}^{\text{+}}(\text{G})}$$

- ebenso, aber mit E statt A

- Es ist $\text{Aut}(G) = \text{Iso Aut}(G)$ in allen Fällen

Dass es sich hier nicht um "zufällige" Resultate handelt, die bei kleinen Dimensionszahlen für kristallographische Gruppen gelten, zeigt der folgende Satz:

$$a \cdot G \cdot a^{-1} = H$$

Dann existiert ein $j \in O(\vec{R}_n)$ derart, dass gilt

$$j \cdot g \cdot j^{-1} = a \cdot g \cdot a^{-1} \quad \text{für alle } g \in G$$

Ist die Dimensionszahl n ungerade, kann j sogar in $O^+(\vec{R}_n)$ gewählt werden.

Dieser Satz scheint schon länger bekannt zu sein. Unser Beweis stammt von Prof. P. Gabriel in Zürich:

Beweis von Satz 1

Wir betrachten zu a die Abbildung $a^T \cdot a$ (a^T ist definiert durch $\langle a(x), y \rangle = \langle x, a^T(y) \rangle$ für alle Paare (x, y)). Die Abbildung $a^T \cdot a$ ist symmetrisch und bestimmt die positiv definite quadratische Form $\langle a^T \cdot a(x), x \rangle$. Die Eigenwerte von $a^T \cdot a$ sind alle reell und positiv: $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_s$. Die dazugehörigen Eigenräume seien $E_1, E_2, \dots, E_s$. Es ist $E_i \perp E_j$ für $i \neq j$. $a^T \cdot a$ kann in einer orthogonalen Basis von Eigenvektoren geschrieben werden als

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_s \end{bmatrix}$$

Wir definieren nun eine Abbildung b dadurch, dass sie in obiger Basis die Darstellung

$$\begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} & & & 0 \\ & \sqrt{\lambda_2} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \sqrt{\lambda_s} \end{bmatrix}$$

haben soll. b ist also ebenfalls symmetrisch und positiv definit, hat dieselben Eigenräume wie $a^T \cdot a$ und es gilt $b^2 = a^T \cdot a$ nebst $b = b^T$.

Wir setzen nun $j := a \cdot b^{-1}$. Es ist $j \in O(\vec{R}_n)$ wegen

$$j^T \cdot j = (ab^{-1})^T \cdot (ab^{-1}) = b^{-1T} \cdot a^T \cdot a \cdot b^{-1} = b^{-1} \cdot b^2 \cdot b^{-1} = 1$$

Was bedeuten nun unsere Voraussetzungen? Es gilt für alle $g \in G$

$$a \cdot g \cdot a^{-1} \in O(\vec{R}_n) \iff (a \cdot g \cdot a^{-1})^T \cdot (a \cdot g \cdot a^{-1}) = 1 \iff$$

$$a^{-1T} \cdot g^T \cdot a^T \cdot a \cdot g \cdot a^{-1} = 1 \iff a^T a g = g^T \cdot a \cdot a^T \cdot a \iff$$

$$a^T a g = g a^T a$$

d.h. jedes g aus G kommutiert mit $a^T a$, woraus folgt $g(E_i) = E_i$ für alle Eigenräume E_i von $a^T a$. g lässt damit auch alle Eigenräume von b invariant und es gilt daher $b \cdot g = g \cdot b$ für alle $g \in G$.

Nun können wir aber zeigen, dass unser $j = a \cdot b^{-1}$ der Behauptung des Satzes genügt:

$$j \cdot g \cdot j^{-1} = (a \cdot b^{-1}) \cdot g \cdot (a \cdot b^{-1})^{-1} = a \cdot b^{-1} \cdot g \cdot b \cdot a^{-1} = a \cdot g \cdot a^{-1}$$

da ja g mit b kommutiert!

Diese Gleichung gilt für alle $g \in G$, und oben haben wir bereits gesehen, dass j in $O(\vec{R}_n)$ liegt.

Ist die Dimensionszahl n ungerade, so ist die Determinante von $-1 \cdot \text{id} = -1$ eben minus Eins, und wir können j durch $-j$ ersetzen, falls $\det(j) = -1$ gelten sollte. □

Aus Satz 1 erhalten wir nun sofort das folgende Korollar:

Korollar Für alle Symmetriegruppen mit Fixpunkt und für alle Punktgruppen gilt

$$\text{Aut}(G) = \text{Iso Aut}(G) \quad \text{und} \quad \text{Aut}^+(G) = \text{Iso Aut}^+(G)$$

Bei ungeraden Dimensionszahlen gilt sogar

$$\text{Aut}(G) = \text{Iso Aut}(G)$$

$$\parallel \qquad \parallel$$

$$\text{Aut}^+(G) = \text{Iso Aut}^+(G)$$

Beweis: Zu jedem Automorphismus $\mathfrak{Y}$ in $\text{Aut}(G)$ existiert per def. eine Abbildung $a \in \text{GL}(\vec{R}_n)$ mit $\mathfrak{Y}(g) = a \cdot g \cdot a^{-1}$ für alle $g \in G$. Nach Satz 1 existiert dann aber auch ein $j \in O(\vec{R}_n)$ mit $j \cdot g \cdot j^{-1} = a \cdot g \cdot a^{-1} = \mathfrak{Y}(g)$ für alle $g \in G$. $\mathfrak{Y}$ wird also auch durch eine orthogonale Abbildung gestiftet. Da $\mathfrak{Y} \in \text{Aut}(G)$ beliebig war, gilt $\text{Aut}(G) \subset \text{Iso Aut}(G)$ und somit $\text{Aut}(G) = \text{Iso Aut}(G)$. Zu jedem $\mathfrak{Y} \in \text{Aut}^+(G)$ existiert ein $a \in \text{GL}(\vec{R}_n)^+$ mit $\mathfrak{Y}(g) = a \cdot g \cdot a^{-1}$ für alle $g \in G$. Die Konstruktion im Beweis von Satz 1 garantiert dann, dass auch $j := a \cdot b^{-1}$ eine positive Determinante hat. $(\det(b) = \sqrt{\lambda_1} \cdot \sqrt{\lambda_2} \cdot \sqrt{\lambda_3} \cdot \dots \cdot \sqrt{\lambda_n} > 0)$. Es gilt also auch $\text{Aut}^+(G) \subset \text{Iso Aut}^+(G)$ und damit $\text{Aut}^+(G) = \text{Iso Aut}^+(G)$. Ist die Dimensionszahl n ungerade, haben wir nach Satz 1 zusätzlich $\text{Aut}(G) \subset \text{Iso Aut}^+(G)$, und es fallen daher alle vier Automorphismengruppen zusammen. □

In Räumen ungerader Dimensionszahl haben wir für Punktgruppen (und Symmetriegruppen mit Fixpunkt) also nur drei Automorphismengruppen zu unterscheiden:

- $\text{Aut}(G) = \text{Aut}^+(G) = \text{Iso Aut}(G) = \text{Iso Aut}^+(G)$
- $\text{Int}(G)$
- $\text{Int}^+(G)$

In Räumen mit gerader Dimensionszahl gilt immer noch $\text{Aut}(G) = \text{Iso Aut}(G)$ und $\text{Aut}^+(G) = \text{Iso Aut}^+(G)$. Diese beiden Gruppen brauchen aber nicht zusammenzufallen, wie das folgende Beispiel zeigt.

Beispiel 2 $n = 2$ $G = 3$ oder $G = 00\ 311$

$$\text{Aut}(G) \cong \frac{N_{O_2(\mathbb{R})}(G)}{C_{O_2(\mathbb{R})}(G)} = \frac{O_2(\mathbb{R})}{O_2^+(\mathbb{R})} = \frac{D_\infty}{C_\infty} \cong C_2 \quad \text{!}$$

$$\text{Aut}^+(G) \cong \frac{N_{O_2^+(\mathbb{R})}(G)}{C_{O_2^+(\mathbb{R})}(G)} = \frac{O_2^+(\mathbb{R})}{O_2^+(\mathbb{R})} = \frac{C_\infty}{C_\infty} \cong C_1$$

Wir betrachten nun "dieselbe" Symmetriegruppe im dreidimensionalen Raum:

Beispiel 2 (Fortsetzung) $n = 3$ $G = 3$ oder $G = 000\ 311$

$$\text{Aut}(G) \cong \frac{N_{O_3(\mathbb{R})}(G)}{C_{O_3(\mathbb{R})}(G)} = \frac{\begin{smallmatrix} 3 & 2 & 2 \\ n & n & n \end{smallmatrix}}{\begin{smallmatrix} 3 & 1 & 1 \\ n & & \end{smallmatrix}} \cong \{1, 2_x\} \quad \text{!}$$

$$\text{Aut}^+(G) \cong \frac{N_{O_3^+(\mathbb{R})}(G)}{C_{O_3^+(\mathbb{R})}(G)} = \frac{\begin{smallmatrix} 3 & 2 & 2 \\ n & n & n \end{smallmatrix}}{\begin{smallmatrix} 3 & 1 & 1 \\ n & & \end{smallmatrix}} \cong \{1, 2_x\}$$

Es ist leider nicht immer möglich, die Faktorgruppen, welche die Automorphismengruppen darstellen, durch einfache Symmetriegruppen zu ersetzen. (Bei Raumgruppen geht das allerdings immer, vgl. dazu § 6.) Das nächste Beispiel zeigt einen solchen Fall:

Beispiel 3 $G = \bar{n}2m$ (n gerade) ; also z.B. $\bar{4}2m$

$$\text{Aut}(G) \cong \frac{N_{\bar{n}2m}(G)}{C_{\bar{n}2m}(G)} = \frac{n22}{211}$$

Es gibt also $2n : 2 = n$ Automorphismen, und diese erhalten wir durch jedes Repräsentantensystem der Links- oder Rechtsnebenklassen von 211 in $n22$. Es gibt aber kein solches Repräsentantensystem, welches selber wieder eine Untergruppe von $n22$ ist.

Wir werden also in der Tabelle 8.4 der Automorphismengruppen von Punktgruppen ($\dim n = 3$) nicht vermeiden können, dass die eine oder andere Faktorgruppe als solche stehen bleibt und keine entsprechende Symmetriegruppe in der Spalte 2) besitzt. Wir wissen nun, wie wir die Tabelle 8.4 leicht aus den Resultaten von § 2 ableiten können. Für die Gruppe $\text{Aut}(G)$ wählen wir mit Vorteil die einfachste Darstellung als Quotient von $N_{\mathbb{E}^+}(G)$ und $C_{\mathbb{E}^+}(G)$.

Ein letztes Beispiel soll noch zeigen, wie einfach die Automorphismengruppen auch in der Darstellung durch Faktorgruppen erkannt werden können:

Beispiel 4 $G = m\bar{m}2 = m_x m_y 2$. Tabelle 8.2 liefert uns $N_{\mathbb{E}^+}(G) = 422$ und $C_{\mathbb{E}^+}(G) = 222$. Daraus

$$\text{Aut}(G) \cong \frac{422}{222} = \{222, 4 \cdot 222\} = \{[1], [4]\}$$

wenn wir mit $[a]$ die Nebenklasse $a \cdot C_{\mathbb{E}^+}(G)$ bezeichnen. Die beiden Automorphismen werden also durch Konjugation mit 1 resp. 4 hergestellt.

Da G kommutativ ist, haben wir noch

$$\text{Int}(G) = \text{Int}^+(G) = \{1\}$$

3.2 Komprimierte Untergruppendiagramme

Ein Automorphismus Ψ einer Gruppe G operiert in natürlicher Weise auf der Gruppe durch

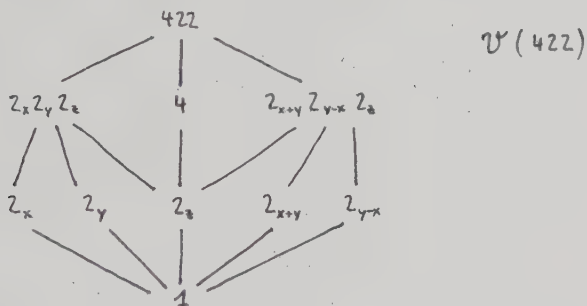
$$\Psi * g = \Psi(g) \quad \text{für alle } g \text{ in } G$$

Diese Operation induziert aber auch eine Operation auf der Menge der Untergruppen von G durch

$$\Psi * H = \Psi(H) = \{\Psi(h) \mid h \in H\}$$

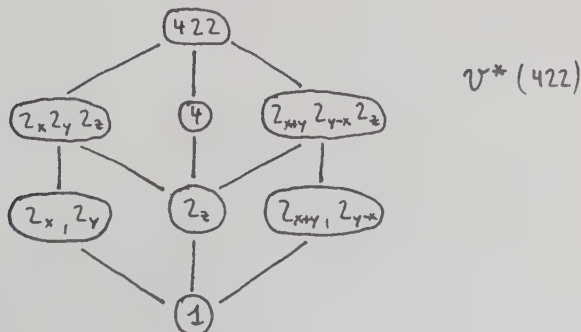
Unter jeder Automorphismengruppe von G fallen also gewisse Untergruppen in einer *Bahn* zusammen, und man hat nebst dem Verband aller Untergruppen von G noch zu jeder Automorphismengruppe von G eine geordnete Menge von Bahnen von Untergruppen. Die Ordnungsrelation ergibt sich aus den Untergruppenbeziehungen: Zwei Bahnen B_1 und B_2 erfüllen $B_1 \leq B_2$, falls Untergruppen H_1 in B_1 und H_2 in B_2 existieren mit $H_1 \subseteq H_2$.

Wir machen ein ausgedehntes Beispiel. Wir betrachten eine Punktgruppe vom Typ 422. Der Verband $\mathcal{V}$ aller Untergruppen hat dann die folgende Gestalt:

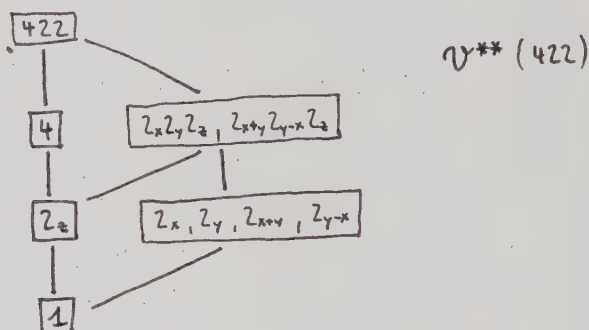


Die Automorphismengruppe $\text{Int}(G) = \text{Int}^+(G) \cong \frac{422}{2_z 11} = \{[1], [4], [2_x], [2_{xy}]\}$ lässt die Untergruppen 2_x und 2_y einerseits sowie 2_{xy} und 2_{y-x} andererseits in einer Bahn zusammenfallen. Alle übrigen Untergruppen bilden eine Bahn für sich. Diese Bahnen sind identisch mit den Konjugationsklassen von Untergruppen (innere Automorphismen werden ja durch die Konjugation mit einem Gruppenelement hergestellt). Diejenigen Bahnen, welche nur eine einzige Untergruppe enthalten, enthalten also gerade die normalen Untergruppen, das sind diejenigen, welche in der Gruppe nur zu sich selber konjugiert sind.

Die geordnete Menge $\mathcal{V}^*$ der Konjugationsklassen von Untergruppen resp. der Bahnen von $\text{Int}(G)$ auf $\mathcal{V}$ lässt sich also durch das folgende Diagramm darstellen:

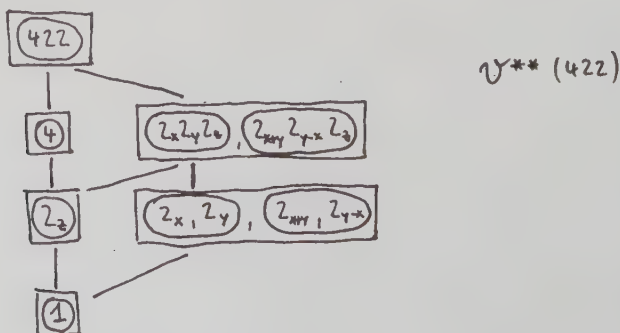


Lassen wir nun die Automorphismengruppe $\text{Aut}(422) \cong \frac{822}{211}$ auf dem Verband $\mathcal{V}$ operieren, erhalten wir die Menge $\mathcal{V}^{**}$ von Äquivalenzklassen von Untergruppen von 422 oder, anders gesagt, die Menge $\mathcal{V}^{**}$ von Bahnen von $\text{Aut}(422)$ auf $\mathcal{V}$. Diese Menge hat noch 6 Elemente und ist folgendermassen geordnet:

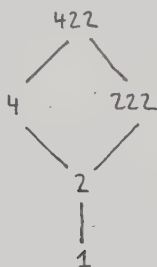


Die Bahnen, welche jetzt immer noch genau eine Untergruppe enthalten, enthalten gerade die charakteristischen Untergruppen von 422 (vgl. § 7).

Dieselbe geordnete Menge erhalten wir, wenn wir $\text{Aut}(422)$ auf $\mathcal{V}^*$ statt auf $\mathcal{V}$ operieren lassen. In dieser Darstellung werden alle Informationen ineinandergeschachtelt, man sieht, welche Untergruppen normal oder sogar charakteristisch sind und welche jeweils zueinander konjugiert resp. äquivalent sind:



Die hier anhand eines Beispiels vorgestellten "komprimierten Untergruppendiagramme" $\mathcal{V}^*$ und $\mathcal{V}^{**}$ enthalten sehr viel mehr Information über die Untergruppen und die Gruppenstruktur von G als eine andere Kompression des Untergruppenverbandes $\mathcal{V}(G)$, die Neubüser und Wondratschek in [34] vorschlagen. Die beiden Autoren lassen einfach alle Untergruppen mit demselben Hermann-Mauguin-Symbol zusammenfallen. In unserem Beispiel wird diese Menge mit ihrer Ordnungsstruktur durch das folgende Diagramm dargestellt:



Es kommt nicht mehr zum Ausdruck, dass die Untergruppe 2_Z in 422 von den übrigen 4 Untergruppen dieses Typs wesentlich verschieden ist: 2_Z ist das Zentrum von 422 , also eine charakteristische Untergruppe, während die übrigen Untergruppen vom Typ 2 nicht einmal normal sind in 422 . Die differenziertere Betrachtungsweise, die den Verbänden $\mathcal{V}^*$ und $\mathcal{V}^{**}$ zugrunde liegt, wird schon von P. Niggli in [35] angestellt. So gibt z.B. Fig. 21 auf Seite 78 gerade ein Diagramm von $\mathcal{V}^* = \mathcal{V}^{**}$ für $m3m$ wieder.

Zu seiner Auflockerung hat der Autor dieser Arbeit den Verband $\mathcal{V}$ sowie die geordneten Mengen $\mathcal{V}^*$ und $\mathcal{V}^{**}$ sämtlicher kristallographischen Punktgruppen sowie der Untergruppen der Ikosaedergruppe bestimmt. Die Tabelle 8.5 enthält diese Resultate für einige ausgewählte Punktgruppen.

Mit den Mengen $\mathcal{V}$, $\mathcal{V}^*$ und $\mathcal{V}^{**}$ lassen sich oft Äquivalenzaussagen elegant und präzise formulieren. So entsprechen die Äquivalenzklassen von transitiven Farb-

gruppen über einer Punktgruppe G gerade den Elementen von $\mathcal{V}^{**}(G)$ (vgl. dazu [40]). Jede allgemeine Farbgruppe, welche in p Transitivitätsgebiete zerfällt, bestimmt eindeutig ein Element von $(\mathcal{V}^*)^p = \mathcal{V}^* \times \mathcal{V}^* \times \dots \times \mathcal{V}^*$ (p mal). Die Äquivalenzklassen von allgemeinen Farbgruppen mit p Transitivitätsgebieten entsprechen dann den Bahnen von $\text{Aut}(G)$ auf $(\mathcal{V}^*)^p$. Zählen wir alle Elemente der Mengen $\mathcal{V}^{**}(G)$ zusammen, wo G die 32 Klassen von dreidimensionalen kristallographischen Punktgruppen durchläuft, so erhalten wir die Zahl 244. Es gibt also 244 Äquivalenzklassen von transitiven Farbgruppen über den kristallographischen Punktgruppen (vgl. dazu D. Harker in [21]).

§4 Die Berechnung der Normalisatorgruppe in $\mathbb{A}$ einer beliebigen Symmetriegruppe G

4.1 Übersicht über die verwendete Berechnungsmethode

Wir benützen die Tatsache, dass jede Untergruppe K von $\mathbb{A}$ eine kurze exakte Folge

$$\Gamma_K \xrightarrow{i} K \xrightarrow{p} \tilde{K}$$

bestimmt. Die Abbildung p entspricht dabei unserer Projektion $\sim$ von Abschnitt 2.1 (genauer: Sie ist die Restriktion von $\sim$ auf K), und Γ_K ist der Kern von p , also die Untergruppe aller Translationen in K . i ist die Inklusion oder Einbettung von Γ_K in K .

Für kurze exakte Folgen konsultiert man etwa Schwarzenberger [39], Appendix, oder Ascher/Janner [3].

Für jede Symmetriegruppe G gilt weiter nach den Definitionen in § 1

$$G \subset N_E(G) \subset N_A(G) \subset \mathbb{A}$$

Damit bestimmt jede Symmetriegruppe das folgende System von kurzen exakten Folgen:

$$\begin{array}{ccccc} \text{Alle Translationen} & \xrightarrow{i} & \mathbb{A} & \xrightarrow{p} & \tilde{\mathbb{A}} \cong GL_n(\mathbb{R}) \\ \uparrow i & & \uparrow i & & \uparrow i \\ \Gamma_{N_A}(G) & \xrightarrow{i} & N_A(G) & \xrightarrow{p} & \widetilde{N_A(G)} \\ \uparrow \text{id} & & \uparrow i & & \uparrow i \\ \Gamma_{N_E}(G) & \xrightarrow{i} & N_E(G) & \xrightarrow{p} & \widetilde{N_E(G)} \\ \uparrow i & & \uparrow i & & \uparrow i \\ \Gamma_G & \xrightarrow{i} & G & \xrightarrow{p} & \tilde{G} \end{array}$$

Man beachte, dass immer $\Gamma_{N_A}(G) = \Gamma_{N_E}(G)$ gilt, oder mit andern Worten, dass $N_E(G)$ eine translationengleiche Untergruppe von $N_A(G)$ ist, weil ja alle Translationen Isometrien sind. Wir werden deshalb einfach $\Gamma_N(G)$ schreiben für $\Gamma_{N_A}(G)$ und $\Gamma_{N_E}(G)$.

Unsere Methode, $N_A(G)$ (und damit $N_E(G)$) zu berechnen, folgt vier Schritten:

Schritt 1 . Berechne die Translationengruppe $\Gamma_N(G)$.
Dieser Schritt wird im nächsten Abschnitt 4.2 behandelt.

Schritt 2 Schätze die Punktgruppe von $N_A(G)$ ab, d.h. finde eine Gruppe $\widetilde{N_A(G)^*}$, von der man weiss, dass $\widetilde{N_A(G)} \subset \widetilde{N_A(G)^*}$ gilt, und von der man aber hoffen darf, dass sogar $\widetilde{N_A(G)} = \widetilde{N_A(G)^*}$ gilt. Wie da der Intuition nachgeholfen werden kann, wird in 4.3 beschrieben.

Schritt 3 Bilde mit $\Gamma_N(G)$ aus Schritt 1 und $\widetilde{N_A(G)^*}$ aus Schritt 2 eine Kurze Exakte Folge

$$\Gamma_N(G) \xrightarrow{i} N_A(G)^* \xrightarrow{p} \widetilde{N_A(G)^*}.$$

Die Hoffnung ist dabei entsprechend, dass $N_A(G)^* = \widetilde{N_A(G)^*}$ gilt. Die Konstruktion der μ -Folge ist in den meisten Fällen sehr einfach, so genügt bei den 230 Typen von dreidim. Raumgruppen in 189 Fällen das semidirekte Produkt.

Schritt 4 Zeige, dass G eine normale Untergruppe von $N_A(G)^*$ ist. Dieser Teilaufgabe ist der Abschnitt 4.5 gewidmet.

Wenn es uns gelingt, den vierten Schritt durchzuführen, sind wir fertig, d.h. es gilt dann

$$N_A(G) = N_A(G)^*.$$

Aus Schritt 4 folgt nämlich, dass $N_A(G)^* \subset N_A(G)$ gilt, da ja $N_A(G)$ definitionsgemäss die grösste Untergruppe von A ist, die G als normale Untergruppe enthält. Damit gilt speziell auch $\widetilde{N_A(G)^*} \subset \widetilde{N_A(G)}$, und zusammen mit Schritt 2 ergibt das $\widetilde{N_A(G)^*} = \widetilde{N_A(G)}$. Demnach ist aber $N_A(G)^*$ eine klassengleiche Untergruppe von $N_A(G)$. Aus den Schritten 1 und 3 wissen wir aber auch, dass $N_A(G)^*$ eine translationengleiche Untergruppe von $N_A(G)$ ist. Beides zusammen ergibt die Behauptung.

$N_E(G)$ könnte man ganz analog berechnen, indem man überall A durch E ersetzt. Wenn man aber $N_A(G)$ schon kennt, ist es einfacher, $N_E(G)$ nach der Beziehung

$$N_E(G) = N_A(G) \cap E$$

abzuleiten.

Während wir für die Schritte 1 und 4 algebraische Verfahren angeben können, braucht die Behandlung der Schritte 2 und 3 immer noch etwas Intuition, und insofern ist das allgemeine Problem noch nicht vollständig gelöst. Für die 230 Typen von Raumgruppen im dreidimensionalen Raum ist das Verfahren aber im Detail durchgeführt worden und die Resultate sind in § 9 zusammengestellt.

In diesem Abschnitt war G eine beliebige Symmetriegruppe, und auch die Ueberlegungen in den folgenden Abschnitten dieses § haben allgemeine Gültigkeit. Wir wollen aber immer die spezielle Anwendung auf die (dreidim.) Raumgruppen im Auge behalten und haben die Beispiele dementsprechend ausgewählt.

4.2 Die Berechnung von $\Gamma_N(G)$

$\Gamma_N(G)$ besteht aus allen Translationen t , welche der Gleichung

$$t \cdot G \cdot t^{-1} = G \quad (1)$$

genügen. In der Seitz-Notation (lies $(A|a)$ für (A,a)) ist das die Bedingung

$$(1,a) \cdot G \cdot (1,a)^{-1} = G \quad (2)$$

(2) ist äquivalent zu (3) und zu (4):

$$(1,a) \cdot (S,s) \cdot (1,a)^{-1} \in G$$

für alle $(S,s) \in G$ (3)

$$(S, a + s - S(a)) \in G$$

für alle $(S,s) \in G$ (4)

$(S, a + s - S(a))$ ist aber genau dann in G (für $(S,s) \in G$), falls $(1, a - S(a))$ ein Gittervektor von G ist. (4) ist also äquivalent zu (5)

$$a - S(a) \in \Gamma_G$$

für alle S in $\tilde{G}$ (5)

Weiter genügt es, die Bedingung (5) (oder eine der äquivalenten Bedingungen (1) bis (4)) für ein Erzeugendensystem von G resp. $\tilde{G}$ zu prüfen:

$$a - S(a) \in \Gamma_G$$

für alle S eines Erzeugendensystems von $\tilde{G}$ (6)

Führen wir noch ein Koordinatensystem für G (und damit per Projektion auch für $\tilde{G}$) ein, so ergibt sich aus (6) das System (7) von Matrixgleichungen:

$$\begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} - [A] \cdot \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \mod \Gamma_G \quad \text{für alle } A \text{ eines Erzeugendensystems von } \tilde{G} \quad (7)$$

$\Gamma_N(G)$ besteht also aus allen Lösungen $\begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix}$ von (7). Diese lassen sich aber leicht berechnen. Für endlich erzeugte Punktgruppen $\tilde{G}$ (und alle kristallographischen Punktgruppen sind endlich erzeugt) ist die Bedingung (7) sogar ein endlicher Satz von linearen Beziehungen und könnte also von einer Maschine gelöst werden.

Aus den Gleichungen (5) oder (7) geht insbesondere hervor, dass $\Gamma_N(G)$ nur eine Funktion von Γ_G und $\tilde{G}$ ist und nicht von der speziellen Art der μ -Erweiterung von $\tilde{G}$ durch Γ_G abhängt. Raumgruppen derselben arithmetischen Klasse liefern also dasselbe Gleichungssystem (7), es genügt also, (7) für die 73 symmorphen Typen von Raumgruppen zu lösen.

Beispiel 1 Wir berechnen $\Gamma_N(\text{Pmm2})$. Wir wählen m_x und 2_z als Erzeugendensystem von $\tilde{G} = \text{mm2}$, und die Bedingung (7) ergibt

$$\begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \mod \Gamma_G \quad \text{und}$$

$$\begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \mod \Gamma_G$$

Das ergibt die Bedingungen

$$\begin{bmatrix} p+p \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{bmatrix} p+p \\ q+q \\ 0 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \mod \Gamma_G$$

Da Γ_G allen ganzzahligen Spalten entspricht, sind die Lösungen

$$p \in \frac{1}{2} \cdot \mathbb{Z}, \quad q \in \frac{1}{2} \cdot \mathbb{Z} \quad \text{und} \quad r \in \mathbb{R}$$

$$\text{Wir haben also} \quad \Gamma_N(\text{Pmm2}) = D_2 D_2 K$$

Beispiel 2

Wir suchen $\Gamma_N(G)$ für $G = F222$. Erzeugende von $\mathcal{N}_G$ sind z.B. 2_x und 2_z . Die Bedingung (7) ergibt

$$(7)' \quad \begin{bmatrix} 0 \\ q+q \\ r+r \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \pmod{\Gamma_G} \quad \text{und}$$

$$\begin{bmatrix} p+p \\ q+q \\ 0 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \pmod{\Gamma_G}$$

$$\text{Jetzt haben wir aber z.B. } \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ 0 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \pmod{\Gamma_G},$$

da Γ_G F-zentriert ist. Deshalb ist (7)' äquivalent zu

$$(7)'' \quad \left[\begin{array}{l} q \text{ und } r \text{ Elemente von } \frac{1}{2} \cdot \mathbb{Z} \text{ oder} \\ q \text{ und } r \text{ Elemente von } \frac{1}{2} \cdot \mathbb{Z} + \frac{1}{4} \end{array} \right]$$

und

$$\left[\begin{array}{l} p \text{ und } q \text{ Elemente von } \frac{1}{2} \cdot \mathbb{Z} \text{ oder} \\ p \text{ und } q \text{ Elemente von } \frac{1}{2} \cdot \mathbb{Z} + \frac{1}{4} \end{array} \right]$$

Zusammengezogen ergibt sich die Bedingung

$$(7)''' \quad \left[\begin{array}{l} p, q \text{ und } r \in \frac{1}{2} \cdot \mathbb{Z} \text{ oder} \\ p, q \text{ und } r \in \frac{1}{2} \cdot \mathbb{Z} + \frac{1}{4} \end{array} \right]$$

Dies entspricht offenbar einem I-zentrierten Gitter mit halbierten Gitterkonstanten:

$$\Gamma_N(F222) = D_2 D_2 D_2 \quad (I).$$

Beispiel 3 Wir suchen $\Gamma_N(G)$ für $G = P 4_2 b c$. Erzeugendensystem von $G = 4mm$: 4 und m_x . Bedingung (7) liefert also

$$\begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{und}$$

$$\begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{mod } \Gamma_G$$

Also

$$\begin{bmatrix} p+q \\ q-p \\ 0 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{bmatrix} p+p \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{mod } \Gamma_G$$

Also $p+q \in \mathbb{Z}$, $q-p \in \mathbb{Z}$, $p \in \frac{1}{2} \cdot \mathbb{Z}$, $r \in \mathbb{R}$ beliebig. Dies ist äquivalent zu $(p \text{ und } q \in \mathbb{Z})$ oder $(p \text{ und } q \in \mathbb{Z} + \frac{1}{2})$, $r \in \mathbb{R}$ beliebig. Das entsprechende Translationsgitter ist DDK(C)

$$\text{oder für } M = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & -\sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{bmatrix} \quad M(\text{DDK})(P) = M(\text{DDK}).$$

Für die tetragonalen Normalisatorgruppen werden wir die Blickrichtungen der zweiten Beschreibungsort brauchen.

Tabelle 9.1 gibt die Gruppen $\Gamma_N(G)$ für die 73 arithmetischen Klassen von Raumgruppen und damit für alle 230 Raumgruppentypen.

4.3 Die Suche nach einer oberen Schranke von $\widetilde{N_A(G)}$

Wir suchen im zweiten Schritt unserer Berechnung von $N_A(G)$ eine Punktgruppe $\widetilde{N_A(G)^*}$, von der wir zeigen können, dass sie eine obere Schranke von $\widetilde{N_A(G)}$ ist (also dass gilt $\widetilde{N_A(G)} \subset \widetilde{N_A(G)^*}$), wobei wir aber hoffen, dass $\widetilde{N_A(G)} = \widetilde{N_A(G)^*}$ gilt.

Die mögliche Form von Elementen (A,a) von $N_A(G)$ ist allgemein durch die folgende Bedingung (8) eingeschränkt:

$$(A,a) \cdot (S,s) \cdot (A,a)^{-1} \in G \quad \text{für alle } (S,s) \in G \quad (8)$$

Das liefert sofort eine erste Einschränkung für die Punktanteile der Elemente von $N_A(G)$:

$$A \cdot S \cdot A^{-1} \in G \quad \text{für alle } S \in G \quad (9)$$

Es gilt offenbar

$$N_A(G) \subset N_A^{\vee}(G)$$

und wir können für die weitere Einschränkung von $\widetilde{N_A(G)}$ von den Normalisatorgruppen der Punktgruppen in $GL_n(\mathbb{R})$ ausgehen, wie wir sie in § 2 berechnet haben. Weitere Einschränkungen sind aber meistens nötig, nur bei den kubischen Raumgruppen gilt häufig $N_A(G) = N_A^{\vee}(G)$.

Bedingung (8) liefert speziell für die Translation $(1,s)$ aus G die Bedingung

$$(A,a) \cdot (1,s) \cdot (A,a)^{-1} = (1, A(s)) \in \Gamma_G \quad \text{für alle } (1,s) \in \Gamma_G \quad (10)$$

(10) schreibt sich kürzer als

$$A(\Gamma_G) = \Gamma_G \quad (11)$$

Für Raumgruppen ist also $N_A(G)$ immer isomorph zu einer Untergruppe von $GL_n(\mathbb{Z})$, und die Determinante der Elemente $A \in N_A(G)$ ist also immer 1 oder -1.

Ziehen wir (9) und (11) zusammen, erhalten wir

$$\widetilde{N_A(G)} \subset N_A^{\vee}(G) \cap N_A^{\vee}(\Gamma_G) \quad (12)$$

In vielen Fällen genügt es, $\widetilde{N_A(G)}^*$ wie auf der rechten Seite von (12) zu wählen. (12) reicht auch, um den folgenden Satz zu beweisen:

Satz 1 Für wirtelige und kubische Raumgruppen gilt $N_A(G) = N_E(G)$.

Speziell gilt nämlich für die verschiedenen Systeme:

$$\begin{aligned} \text{tetragonal} & : \widetilde{N_A(G)} \subset \frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \\ \text{trigonal und hexagonal} & : \widetilde{N_A(G)} \subset \frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \\ \text{kubisch} & : \widetilde{N_A(G)} \subset \frac{4}{m} \frac{3}{3} \frac{2}{m} \end{aligned}$$

Beweis Hat man $\widetilde{N_A(G)} \subset \mathbb{E}^{\vee} = O_3(\mathbb{R})$ gezeigt, so folgt $N_A(G) \subset N_E(G)$ sofort, weil man dann weiss, dass $N_E(G)$ eine translationengleiche und klassengleiche Untergruppe von $N_A(G)$ ist. Wir brauchen also nur die behaupteten Inklusionen zu zeigen.

Der erste Teil von (12), also die Bedingung $\widetilde{N_A(G)} \subset N_A^{\vee}(G)$, liefert uns z.B. für hexagonale Raumgruppen G die Bedingung

$$\widetilde{N_A(G)} \subset \frac{\infty}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \times \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+,$$

wobei in den Faktoren $\mathbb{R}^+$ gewisse Streckungsfaktoren verpackt sind (siehe § 2). (11) liefert zusätzlich $N_A(G) \subset \frac{\infty}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$, die Streckungsfaktoren müssen 1 betragen.

(11) verlangt aber mehr. Nur die Elemente der Untergruppe $\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ von $\frac{\infty}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ genügen (11) bekanntlich völlig, wenn G eine trigonale oder hexagonale Raumgruppe ist. Damit ist aber gezeigt, dass gilt

$$N_A(G) \subset \frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}.$$

Die Beweise für tetragonale und kubische Gruppen sind ähnlich.

Die notwendige Einschränkung (12) von $N_A(G)$ wollen wir immer beachten. Sie genügt aber im allgemeinen noch nicht. Die Idee, welche zu (11) führte, lässt sich aber stark verallgemeinern. Dafür brauchen wir den Begriff der *charakteristischen Untergruppe* einer Symmetriegruppe. Wir haben ihn schon im Abschnitt 2.2 kurz erwähnt, wiederholen aber hier die Definition:

Definition Sei G eine Gruppe, H eine Untergruppe von G . H heisst charakteristische Untergruppe von G , falls jeder Automorphismus von G H auf sich selbstabbildet und somit einen Automorphismus von H induziert.

Für jede Raumgruppe G ist zum Beispiel Γ_G eine charakteristische Untergruppe. Jeder Automorphismus von G entspricht einer Konjugation in A , und Konjugationen führen Translationen in Translationen über. Also bildet jeder Automorphismus von G Γ_G auf sich ab. Es ist aber in den meisten Fällen leicht, weitere nichttriviale charakteristische Untergruppen anzugeben. Ausführlicher greifen wir diese Frage dann in § 7 auf.

Uns interessiert hier der folgende Zusammenhang: Ist G eine Symmetriegruppe und H eine *charakteristische* Untergruppe von G , so gilt

$$N_A(G) \subset N_A(H) \quad \text{und daher} \quad \widetilde{N_A(G)} \subset \widetilde{N_A(H)}$$

Gilt nämlich für ein $a \in A$ $a \cdot G \cdot a^{-1} = G$, so gilt auch $a \cdot H \cdot a^{-1} = H$, weil H charakteristisch ist und durch den von a bestimmten Automorphismus von G auf sich selbst abgebildet wird. Der Normalisator von H in A enthält also alle Elemente des Normalisators von G in A .

Dies gilt für alle charakteristischen Untergruppen H , und daher gilt

$$N_A(G) \subset \bigcap \{ N_A(H) \}, \text{ wo } H \text{ eine charakteristische Untergruppe von } G \text{ ist.} \quad (13)$$

Zusammen mit (9) ergibt sich

$$\widetilde{N_A(G)} \subset \widetilde{N_A(G)} \bigcap \{ N_A(H) \} \quad (14)$$

H char.
UG von G

(14) bringt uns die gewünschten weiteren Einschränkungen von $N_A(G)$, falls wir geeignete charakteristische Untergruppen H finden. Wenn man die Raumgruppen in der Reihenfolge der Int. Tables behandelt, hat man die $N_A(H)$ der niedriger symmetrischen charakteristischen Untergruppen immer zur Verfügung, wenn man sie gemäss (13) oder (14) benutzen möchte.

Tatsächlich ist es so oft möglich, $N_A(G)$ direkt abzuschätzen aus (13), und man kann dann direkt mit dem Schritt 4 unserer Methode weiterfahren.

Beispiel 4 Sei G eine Raumgruppe vom Typ Pbcm. Das volle Hermann-Mauguin-Symbol ist $P \frac{2}{b} \frac{2_1}{c} \frac{2_1}{m}$. Die drei translationengleichen Untergruppen $P \frac{2}{b} 1 1$, $P 1 \frac{2_1}{c} 1$ und $P 1 1 \frac{2_1}{m}$ sind offenbar

charakteristisch, weil sie je die einzigen translationengleichen Untergruppen von ihrem Typus sind. Daher ist nach (13) $N_A(G)$ eine Untergruppe des Durchschnitts der drei zylindrischen Normalisatorgruppen dieser Untergruppe, also

$$N_A(G) \subset D_2 D_2 D_2 \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$$

und daraus $N_A(G) = N_E(G)$.

In der Tat können wir mit $N_A(G)^* = D_2 D_2 D_2 \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ erfolgreich in Schritt 4 steigen.

Beispiel 5 Jede kubische Raumgruppe G enthält eine charakteristische translationengleiche orthorhombische Untergruppe H , die aus allen Symmetrietransformationen besteht, welche die 3 kubischen Hauptachsen invariant lassen (2 resp. 2₁ auf den Hauptachsen und allfällige dazu senkrechte Spiegel- oder Gleitspiegelebenen mit Inversionszentrum). In 26 von 35 Fällen gilt $N_A(G) = N_A(H)$!

Beispiel: $G = F \frac{2}{d} \bar{3}$. Es ist $H = F \frac{2}{d} \frac{2}{d} \frac{2}{d}$
 und $N_A(H) = D_2 D_2 D_2 (P) \frac{4}{n} \bar{3} \frac{2}{m}$.
 Mit $N_A(G)^* = N_A(H)$ kann man erfolgreich in Schritt 4 gehen.

Damit wir weitere Beispiele anführen können, müssen wir eine Notation für die auftretenden nichtisometrischen Gruppen einführen. Wir wollen dies im folgenden Abschnitt tun.

4.4 Die Struktur der bei dreidimensionalen Raumgruppen auftretenden affinen Normalisatorgruppen

Die Normalisatorgruppen $N_A(G)$ von wirteligen und kubischen Raumgruppen sind nach Satz 1 Gruppen von Isometrien. Ihre Struktur wird daher durch die Hermann-Mauguin-Buchmann-Notation (Appendix Teil C) vollständig beschrieben. Im orthorhombischen, monoklinen und triklinen System treten aber nicht-isometrische affine Gruppen auf, für deren Beschreibung wir weitere Hilfsmittel brauchen. Die auftretenden affinen Gruppen sind jedoch in den meisten Fällen nicht sehr kompliziert: Entweder sind sie semidirekte Produkte über ihren Translationsnormalteilern (im triklinen und monoklinen Fall, Ausnahmen Bb und $B\frac{2}{b}$), oder sie sind konjugiert in A zu einer Gruppe von Isometrien (orthorhombisches System, ohne Ausnahmen). In vielen Fällen gilt sogar beides.

Für orthorhombische Gruppen G folgt aus (12) nämlich direkt

$$\widetilde{N_A(G)} \subset \begin{bmatrix} |a| & 0 & 0 \\ 0 & |b| & 0 \\ 0 & 0 & |c| \end{bmatrix} \cdot [m3m] \cdot \begin{bmatrix} |a| & 0 & 0 \\ 0 & |b| & 0 \\ 0 & 0 & |c| \end{bmatrix}^{-1}$$

wenn $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ die Vektoren einer konventionellen Basis von Γ_G sind. Konjugieren wir ganz $N_A(G)$ mit dieser Transformation, so erhalten wir also eine Gruppe von Isometrien (eine affine Transformation ist genau dann eine Isometrie, wenn ihr Punktanteil eine orthogonale Transformation ist). Diese eindeutig definierte Gruppe von Isometrien hat ein bestimmtes Hermann-Mauguin-Buchmann-Symbol. Wir benützen nun dieses auch für die affine Gruppe, von der wir ausgegangen sind. Um die Affinität der Gruppe aber doch anzudeuten, setzen wir den Punktgruppenanteil im Symbol zwischen Anführungsstriche:

$$N_A(P222) = D_2 D_2 D_2 \text{ 'm3m' }, \text{ daraus } N_E(P222) = D_2 D_2 D_2 \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$$

$$N_A(Cmma) = D_2 D_2 D_2 \frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}, \text{ daraus } N_E(Cmma) = D_2 D_2 D_2 \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$$

Für die Beschreibungen der N_A -Gruppen der triklinen und monoklinen Raumgruppen benötigen wir drei Typen von affinen Punktgruppen. Diese beschreiben wir am besten als Matrixgruppen, bezogen auf eine konventionelle Basis der zugrundeliegenden Raumgruppen (bei monoklinen Gruppen sei die z-Achse ausgezeichnet):

$$\text{Kug} \cong \text{GL}_3(\mathbb{Z}) = \left\{ \begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{bmatrix} \mid a, b, c \dots \in \mathbb{Z} \text{ \& det} = \pm 1 \right\}$$

$$\text{Zyl} \cong \text{GL}_2(\mathbb{Z}) \times \{1, -1\} \cong \left\{ \begin{bmatrix} a & b & 0 \\ c & d & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{bmatrix} \in \text{GL}_3(\mathbb{Z}) \right\}$$

$$\text{Zyl B} \cong \left\{ \begin{bmatrix} a & b & 0 \\ c & d & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \in \text{Zyl} \mid \begin{array}{l} a \text{ ungerade \& } c \text{ gerade} \\ (\text{impliziert } d \text{ ungerade}) \end{array} \right\}$$

$$\text{Zyl b} \cong \left\{ \begin{bmatrix} a & b & 0 \\ c & d & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \in \text{Zyl} \mid \begin{array}{l} b \text{ gerade \& } d \text{ ungerade} \\ (\text{impliziert } a \text{ ungerade}) \end{array} \right\}$$

Die Normalisatorgruppen $N_A(G)$ der triklinen Raumgruppen haben die Struktur eines semidirekten Produkts von $\Gamma_N(G)$ und Kug. Wir notieren deshalb einfach

$$G = P1 : N_A(G) = \text{KKK Kug}$$

$$G = P\bar{1} : N_A(G) = D_2 D_2 D_2 \text{ Kug}$$

Dabei ist zu beachten, dass die Transformationen in $N_A(G)$ über die Basiswahl im Translationsgitter Γ_G von G abhängen, und zwar nicht nur in bezug auf ihre Orientierung. Man sollte also eigentlich umständlicher Kug (G) oder Zyl(G) schreiben.

Monokline Raumgruppen haben zylindrische Normalisatorgruppen. Dabei schränkt ein B-zentriertes Gitter Γ_G die allgemeine Punktgruppe Zyl ein zu Zyl B. Eine b-Gleitspiegelebene verlangt Zyl b. Es ist aber zu beachten, dass die Punktgruppen Zyl A und Zyl b identisch sind, m.a.W. Zyl B und Zyl b sind konjugiert in $\tilde{A}$ (sogar in $\text{GL}_3(\mathbb{Z})$). Die bei den monoklinen

Raumgruppen auftretenden $N_A(G)$ -Gruppen haben ebenfalls die Struktur semidirekter Produkte von $\Gamma_N(G)$ und $N_A(G)$ ausser in den 2 Fällen, wo ein B-zentriertes Gitter mit einer b-Gleitspiegelebene kombiniert ist. Wir haben also etwa zum Beispiel:

$$G = P2_1 : N_A(G) = D_2 D_2 K \text{ Zyl}$$

$$G = Pb : N_A(G) = KKD_2 \text{ Zyl } b$$

$$G = B \frac{2}{m} : N_A(G) = D_2 D_2 D_2 \text{ Zyl } B$$

Die Gruppen Bb und $B \frac{2}{b}$ brauchen wie erwähnt eine eingehendere Betrachtung, weil ihre $N_A(G)$ -Gruppen über $\Gamma_N(G)$ nicht in ein semidirektes Produkt zerfallen. Immerhin sind beide N_A -Gruppen als μ -Erweiterungen von $\Gamma_N(G)$ durch $N_A(G) = \text{Zyl } B$ gleich strukturiert: Für $G = Bb$ haben wir $\Gamma_N(G) = KKD_2$, Matrizen aus $\text{Zyl } B$ mit *ungeradem* b werden mit translationalen Anteilen der Gestalt

$$\begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix}, \quad p \in \mathbb{R}, \quad q \in \mathbb{R}, \quad r \in \sqrt{2} \cdot \mathbb{Z} + \sqrt{4}$$

kombiniert, während bei geraden b die Bedingungen

$$p \in \mathbb{R}, \quad q \in \mathbb{R} \quad \& \quad r \in \sqrt{2} \cdot \mathbb{Z} \quad \text{lauten.}$$

Bei $G = B \frac{2}{b}$ sind die Verhältnisse analog, nur ist hier $\Gamma_N(G) = D_2 D_2 D_2$ und daher $p \in \sqrt{2} \cdot \mathbb{Z}$ und $q \in \sqrt{2} \cdot \mathbb{Z}$.

Wir werden diese beiden Gruppen $KKD_2 \text{ Zyl } Bb$ resp.

$D_2 D_2 D_2 \text{ Zyl } Bb$ nennen.

Damit sind wir imstande, alle auftretenden Gruppen zu notieren und können auch noch bequem einige weitere Beispiele geben, um die Effizienz von (13) und (14) darzustellen.

Beispiel 6 Sei G vom Typ $I \text{ bam} = I \frac{2}{b} \frac{2}{a} \frac{2}{m}$.

(14) liefert für die zwei charakteristischen Untergruppen $I \text{ 222}$ und $I \text{ 11} \frac{2}{m}$

$$\widetilde{N_A(G)} \subset \frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m} \cap \text{Zyl} = \frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m},$$

$$\text{In der Tat gilt } N_A(G) = D_2 D_2 D_2 \frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m},$$

(wird in 4.5, Beispiel 9, gezeigt).

Beispiel 7 $G = B \frac{2}{b}$ besitzt die charakteristischen Untergruppen $B2$ und Bb . Nach (13) gilt

$$N_A(G) \subset N_A(B2) = D_2 D_2 K \text{ Zyl } B. \text{ Weiter hat}$$

$$\text{man } N_A(G) \subset N_A(Bb) = KKD_2 \text{ Zyl } Bb.$$

Somit gilt insgesamt

$$N_A(G) \subset D_2 D_2 K \text{ Zyl } B \cap KKD_2 \text{ Zyl } Bb = D_2 D_2 D_2 \text{ Zyl } Bb$$

Man zeigt nun leicht nach Schritt 4, dass gilt

$$N_A(G) = D_2 D_2 D_2 \text{ Zyl } Bb.$$

Beispiel 8 $R \text{ 3m}$ und $R \text{ 3c}$ haben eine charakteristische Untergruppe $G^+ = R \text{ 3}$. Es ist

$$N_A(G^+) = N(\text{DDK}) \bar{3} 1m, \text{ für } N = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & 0 \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

$$(13) \text{ garantiert } N_A(G) \subset N_A(G^+),$$

man zeigt wieder leicht (nach Schritt 4), dass diese Inklusion unecht ist.

4.5 Ist G normal in $N_A(G)^*$?

Zu Beginn des vierten Schrittes haben wir eine Gruppe $N_A(G)^*$, von der wir hoffen, dass sie mit $N_A(G)$ identisch ist, und von der wir auch schon einiges wissen:

- (i) $\Gamma_{N_A(G)^*} = \Gamma_{N_A(G)} = \Gamma_N(G)$ nach den Schritten 1 & 2
- (ii) $\widetilde{N_A(G)} \subset \widetilde{N_A(G)^*}$ nach den Schritten 2 & 3
- (iii) $\widetilde{N_A(G)^*} (\Gamma_G) = \Gamma_G$ wegen (12) in Schritt 2

Falls wir nicht über die Schritte 1 bis 3 auf $N_A(G)^*$ gestossen sind, sondern $N_A(G)$ direkt nach (13) abgeschätzt haben, wissen wir immerhin

$$(iv) \quad N_A(G) \subset N_A(G)^*$$

Aus (iv) folgt (ii) direkt. Da wir aber im folgenden auch (i) und (iii) benötigen, müssen wir in diesem Fall noch die Fragen prüfen:

- Gilt $\Gamma_{N_A(G)^*} \subset \Gamma_{N_A(G)}$ (die Umkehrung folgt aus (iv))?
- Gilt (iii) ?

Die erste Frage können wir immer schnell nach Schritt 1 testen, evtl. haben wir auch schon eine Raumgruppe derselben arithmetischen Kristallklasse behandelt und kennen dann $\Gamma_N(G)$. Allenfalls kann man die Frage auch durch direktes Nachrechnen entscheiden, indem man für eine primitive Basis von $\Gamma_{N_A(G)^*}$ die Bedingung (15) prüft.

Ebenfalls kein Problem stellt die zweite Frage. Falls man bei der Abschätzung nach (13) mindestens eine *translationen-*gleiche charakteristische Untergruppe eingesetzt hat (was sozusagen immer der Fall ist), gilt (iii) automatisch: Sei H diese Untergruppe. Wegen $N_A(G)^* \subset N_A(H)$ gilt dann $N_A(G)^* (\Gamma_H) = \Gamma_H$, und wegen $\Gamma_H = \Gamma_G$ ist (iii) gezeigt.

Wir dürfen also in jedem Fall annehmen, dass unser Kandidat $N_A(G)^*$ die Bedingungen (i), (ii) und (iii) erfüllt. Wir müssen nun zeigen, dass G eine normale Untergruppe von $N_A(G)^*$ ist. Dann wissen wir nach 4.1, dass gilt $N_A(G) = N_A(G)^*$.

Wir haben also folgende Bedingung zu prüfen:

$$(A,a) \cdot (S,s) \cdot (A,a)^{-1} \in G \quad \text{für alle } (S,s) \in G \quad \text{und} \quad (15) \\ \text{für alle } (A,a) \in N_A(G)^*$$

In Abschnitt 4.2 haben wir bemerkt, dass wir die Bedingung (5) nur für ein Erzeugendensystem von $\tilde{G}$ testen müssen. Dies war aber nur von praktischer Bedeutung, da doch die Punktgruppen $\tilde{G}$ hier immer endlich sind. Anders jetzt bei (15): Sowohl G als auch $N_A(G)^*$ sind (für Raumgruppen G) unendliche Gruppen. Es ist hier entscheidend, dass wir (15) nur für einen Satz E'_N von Erzeugenden von $N_A(G)^*$ und einen solchen E'_G von G testen müssen. Wegen (i) dürfen wir zudem von E'_N noch die Translationen weglassen. Die übrig bleibenden Elemente von $N_A(G)^*$ sollen die Menge E_N bilden. Wegen (iii) dürfen wir auch vom Erzeugendensatz E'_G von G die Translationen weglassen, es bleibt E_G übrig. Diese beiden Mengen sind von handlicher Grösse: Bei den dreidim. Raumgruppen können alle Punktgruppen von höchstens drei Elementen erzeugt werden, E_G braucht also nie mehr als drei Elemente zu enthalten. Das selbe gilt für die E_N der orthorhombischen, wirteligen und kubischen Raumgruppen. Tatsächlich bleiben also in der Regel nur einige wenige Multiplikationen auszuführen:

Beispiel 9 In Beispiel 6 behaupteten wir

$$N_A(G)^* = D_2 D_2 D_2 \cdot \frac{422}{mm}$$

sei die Normalisatorgruppe von $G = I$ bam in A . Wir wählen (vgl. Int. Tables [23], S. 164)

$$E_N = \{ '4'_z, 2_x, m_z; \text{ alle in } O, O, O \text{ gelegen} \}$$

$$E_G = \{ n_x, n_y, n_z; \text{ alle in } O, O, O \text{ gelegen} \}$$

2_x und m_z kommutieren mit allen Elementen von E_G , m_z kommutiert auch mit $'4'_z$. Wir brauchen also für (15) nur die folgenden beiden Multiplikationen zu prüfen:

$$'4'_z \cdot n_x \cdot '4'_z^{-1} \quad \text{und} \quad '4'_z \cdot n_y \cdot '4'_z^{-1}.$$

Die erste ergibt n_y und die zweite n_x , beides Elemente von G . Damit ist (15) erfüllt und die Behauptung bewiesen.

Für die triklinen Raumgruppen ist (15) trivialerweise erfüllt, da E_G nur I oder $\bar{I}$ enthält, und die Elemente von E_N alle in O, O, O gelegen gewählt werden können. E_G kommutiert dann mit ganz E_N , und (15) ist trivialerweise erfüllt.

Bei monoklinen Raumgruppen braucht (15) nicht trivial zu sein. Zwar enthält E_G nur eine oder höchstens zwei relativ einfache Symmetrioperationen ($2, 2_1, \bar{I}, m$ oder b), dagegen ist die Menge E_N nicht endlich, da die Punktgruppe von $N_A(G)$ nicht endlich erzeugt ist. Auch dieser Fall stellt aber keine Probleme, es müssen hier einfach eine oder zwei Multiplikationen mit Matrizen von allgemeiner Form durchgeführt werden:

Beispiel 10

$$G = Bb, N_A(G)^* = KKD_2 \text{ Zyl } Bb$$

$$E_G = \{b, \text{ in } z=0 \text{ gelegen}\}$$

$$E_N = \{2_z, m_z, 2_y, \begin{bmatrix} 1 & n & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ für } n \text{ gerade,}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & n & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{4} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ für } n \text{ ungerade}\}$$

$2_z, m_z$ und 2_y kommutieren mit b oder führen b in $-b$ über. Zu prüfen bleibt einmal für gerades n

$$\begin{bmatrix} 1 & n & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1-n & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} 1 & n & 0 & \frac{n}{2} \\ 0 & 1 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1-n & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{n}{2} \\ 0 & 1 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \stackrel{\text{def}}{=} b'$$

b' unterscheidet sich von b durch die Translation $\begin{bmatrix} \frac{n}{2} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$, welche in Γ_G liegt, da n gerade vorausgesetzt war. Also gilt auch $b' \in G$.

Dann müssen wir noch für ungerades n prüfen:

$$\begin{bmatrix} 1 & n & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1/4 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1-n & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1-1/4 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \\
 \begin{bmatrix} 1 & n & 0 & \frac{n}{2} \\ 0 & 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & -1 & 1/4 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1-n & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1-1/4 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{n}{2} \\ 0 & 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & -1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \stackrel{\text{def}}{=} b''$$

Ziehen wir von b'' die Gittertranslation $\begin{bmatrix} n-1 \\ 2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ ab (nun ist ja n ungerade vorausgesetzt!), erkennen wir eine n -Gleitspiegelebene in der Höhe $1/4 \cdot z$, welche in der Tat zu Bb gehört. Wir können noch weiter die Gittertranslation $\begin{bmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 1/2 \end{bmatrix}$ abziehen und sind dann wieder bei b angelangt. Damit ist auch in diesem Fall (15) gezeigt.

§ 5 Die Zentralisatorgruppen von Raumgruppen

In diesem § wollen wir speziell die Zentralisatorgruppen von Raumgruppen berechnen. Nach der Definition in § 1 ist die Zentralisatorgruppe einer Gruppe G in ihrer Obergruppe K diejenige Untergruppe $C_K(G)$ von K , welche alle Elemente h enthält, die mit allen Elementen $g \in G$ kommutieren:

$$C_K(G) \stackrel{\text{def}}{=} \{h \in K \mid h \cdot g = g \cdot h \quad \text{für alle } g \in G\}$$

Ist G eine Symmetriegruppe, erhalten wir also $C_A(G)$ als Lösungsmenge der Bedingung

$$(A,a) \cdot (S,s) = (S,s) \cdot (A,a) \quad \text{für alle } (S,s) \in G \quad (1) \\ \text{mit } (A,a) \in A$$

Analog haben wir für $C_E(G)$ die Bedingung

$$(A,a) \cdot (S,s) = (S,s) \cdot (A,a) \quad \text{für alle } (S,s) \in G \quad (2) \\ \text{mit } (A,a) \in E$$

Für das Zentrum von G , also $Z(G) = C_G(G)$, lautet die Bedingung

$$(R,r) \cdot (S,s) = (S,s) \cdot (R,r) \quad \text{für alle } (S,s) \in G \quad (3) \\ \text{mit } (R,r) \in G$$

Das Zentrum von G ist dabei von besonderem Interesse, da es eine charakteristische Untergruppe von G ist (vgl. 2.5, 4.4 und § 7). In § 1 haben wir gesehen, dass der Zentralisator $C_K(G)$ als Kern von $\mathbb{I}$ eine normale Untergruppe der Normalisatorgruppe $N_K(G)$ ist und somit auch die Faktorgruppe der beiden definiert ist. Wir werden das im nächsten § benötigen.

Während wir für die (schwierigere) Berechnung der wichtigen Normalisatorgruppen eine allgemeine Methode gegeben haben, betrachten wir die Zentralisatorgruppen nur für Raumgruppen. Wir möchten aber doch hervorheben, dass die in 4.1 vorgestellte Methode sich auch zur Berechnung der verschiedenen Zentralisatorgruppen verwenden lässt, man braucht nur in Schritt 1 $\Gamma_N(G)$ durch das entsprechende $\Gamma_C(G)$ zu ersetzen und ebenso in Schritt 2 $N_A(G)$ durch $C_A(G)$. Auch die konkreten Berechnungsmethoden aus 4.2, 4.3 und 4.5 lassen sich ohne weiteres an dieses Problem adaptieren.

Die Beschränkung auf Raumgruppen ergibt nämlich eine ganz erhebliche Vereinfachung, welche Satz 1 ausdrückt:

Satz 1 Sei G eine Symmetriegruppe im n -dimensionalen Raum, Γ_G enthalte n linear unabhängige Translationen. Dann enthält $C_A(G)$ nur Translationen, es ist also $C_A(G) \subset KKK \dots K$

Wir wollen zunächst festhalten, dass die Raumgruppen die Voraussetzungen von Satz 1 erfüllen. Es gibt aber noch weitere Klassen von Gruppen in $\text{Iso}(n)$, die n linear unabhängige Translationen enthalten: Alle diejenigen, deren H-M-B-Symbol den Buchstaben O nicht enthält, die also ausschliesslich D und/oder K aufweisen.

Aus Satz 1 folgt wegen

$$Z(G) \subset C_E(G) \subset C_A(G)$$

sofort, dass auch $Z(G)$ und $C_E(G)$ nur Translationen enthalten, also dass gilt $\widetilde{Z(G)} = \widetilde{C_E(G)} = \widetilde{C_A(G)} = 1$. Das heisst, dass man unter den Voraussetzungen von Satz 1 für die Berechnung der Zentralisatorgruppen nur den Schritt 1 unseres Verfahrens auszuführen braucht, der ja der unproblematischste des ganzen Verfahrens war. Offensichtlich gilt in diesem Fall $C_E(G) = C_A(G)$, wir werden deshalb im weiteren vom Zentrum $Z(G)$ und "der" Zentralisatorgruppe $C(G)$ sprechen.

Nun zum Beweis von Satz 1: .

Sei $(A,a) \in C_A(G)$ beliebig. Es ist $(A,a) \cdot (1,s) \cdot (A,a)^{-1} = (1,A(s))$. Wegen $(A,a) \in C_A(G)$ muss auch $(A,a)(1,s)(A,a)^{-1} = (1,s)$ gelten für $(1,s) \in G$, also $(1,s) = (1,A(s))$ für alle Translationen $(1,s)$ aus G . Anders notiert: Es gilt $A(\alpha) = \alpha$ für alle $\alpha \in \Gamma_G$. Da aber die Translationen aus Γ_G ganz $KKK \dots K$ (n mal) aufspannen, gilt somit $A(\alpha) = \alpha$ für alle Translationen $\alpha \in KKK \dots K$. Daraus folgt aber $A = 1$. Da $(A,a) \in C_A(G)$ beliebig war, ist der Satz bewiesen. $\square$

Wir brauchen also nur die Translationen $(1,a)$ zu suchen, die der Bedingung (1), (2) resp. (3) dieses § genügen. Der Bedingung (3) aus 4.2 entspricht nun

$$(1,a) \cdot (S,s) \cdot (1,a)^{-1} = (S,s) \quad \text{für alle } (S,s) \in G \quad (4)$$

woraus man wie in § 4 erhält:

$$a - S(a) = 0 \quad \text{für alle } S \in \tilde{G} \quad (5)$$

Für Symmetriegruppen G , die den Voraussetzungen von Satz 1 genügen, hängt also $C(G) = C_A(G) = C_E(G)$ nur von der Punktgruppe $\tilde{G}$ ab! Wir können nun wieder entsprechend 4.2 für die 32 Punktgruppen die zugehörigen Zentralisatorgruppen berechnen. Die Zentren erhalten wir dann sofort aus der Beziehung $Z(G) = C(G) \cap \Gamma_G$. Die Resultate dieser einfachen Rechnungen sind in der folgenden Tabelle zusammengetragen:

$\tilde{G}$	$C(G) = C_A(G) = C_E(G)$	$Z(G) = C_G(G)$
1	KKK	DDD
m	KKO	DDO
2, 3, 4, 6, mm2, 3m, 4mm, 6mm	OOK	OOD
Rest	OOO	OOO

Die H-M-B-Symbole sind wie immer auf eine konventionelle Basis von G bezogen.

Interpretieren wir (5) noch etwas anschaulicher: Die Bedingung kann ja auch geschrieben werden als

$$a = S(a) \quad \text{für alle } S \in \hat{G} \quad (5')$$

Es gehören also all diejenigen Translationen zum Zentralisator von G , welche Fixpunkte sind von der Operation von $\hat{G}$ auf KKK . Ist $\hat{G}$ kubisch, oder enthält $\hat{G}$ die Inversion $\bar{1}$, ist demnach unmittelbar klar, dass $C(G) = OOO$ gilt (und damit auch $Z(G) = OOO$).

$Z(G)$ ist also der Fixpunkttraum der Operation von $\hat{G}$ auf KKK , und demnach je nach Dimension von der Gestalt OOO , OOK , KKO resp. KKK in einer geeigneten Basis. Dass dazu gerade die konventionelle Basis von G geeignet ist, zeigt nur, dass die Konventionen vernünftig getroffen worden sind, oder, romantischer ausgedrückt, dass es sich um "natürliche" Konventionen (vgl. dazu die Bemerkungen im Abschnitt 1.5) handelt.

Wir wollen noch anhand eines Beispiels zeigen, dass die Voraussetzungen von Satz 1 wesentlich sind:

Beispiel 1

Wir betrachten eine Balkengruppe G vom Typ $OOD\ 4_{11}$. Es ist $N_E(G) = OOK \frac{\infty}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ und $C_E(G) = OOK \frac{\infty}{m} 11$.

Zudem ist $C_E(G) \stackrel{G}{\neq} C_A(G)$.

Für $G = OOD\ 4_{11}$ hätte man noch

$N_E(G) = OOK \infty 22$ und $C_E(G) = OOK \infty 11$.

In beiden Fällen enthält $C_E(G)$ nicht nur Translationen.

Nun wollen wir noch in zwei Beispielen zeigen, wie leicht sich die Zentralisatorgruppe und das Zentrum einer Raumgruppe aus der vorhergehenden Tabelle ablesen lassen.

Beispiel 2 $G = P 4_2cm = DDD 4_2cm$. Es ist $\hat{G} = 4mm$
 und demnach $Z(G) = OOD 111$ und
 $C(G) = OOK 111$.

Beispiel 3 $G = I ba2 = DDD(I) ba2$. Es ist $\hat{G} = mm2$
 und demnach $Z(G) = OOD = OOD(P) 111$
 und $C(G) = OOK 111$.
 Zum Zentrum von G gehören also alle
 Translationen der Gestalt $n \cdot \vec{c}$, die
 übrigen Translationen zerfallen nach der
 charakteristischen Untergruppe $Z(G)$
 von G in zwei Klassen: in DDO sowie $DDO + \vec{i}$,
 wo $\vec{i}$ die Zentrierungstranslation $\begin{bmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{bmatrix}$ ist.

§ 6 Automorphismen gegen von Raumgruppen

Im Abschnitt 1.3 haben wir 6 verschiedene Automorphismengruppen definiert zu jeder Symmetriegruppe G . Diese Gruppen haben wir in natürlicher Weise als Faktorgruppen aus den entsprechenden Normalisator- und Zentralisatorgruppen erhalten. Stellen wir noch einmal kurz zusammen:

$$\begin{aligned} \text{Aut}(G) &\cong \frac{N_A(G)}{C_A(G)} & ; & \quad \text{Aut}^+(G) \cong \frac{N_A(G)^+}{C_A(G)^+} \\ \text{Iso Aut}(G) &\cong \frac{N_E(G)}{C_E(G)} & ; & \quad \text{Iso Aut}^+(G) \cong \frac{N_E(G)^+}{C_E(G)^+} \\ \text{Int}(G) &\cong \frac{N_G(G)}{C_G(G)} = \frac{G}{Z(G)} & ; & \quad \text{Int}^+(G) = \frac{N_G(G)^+}{C_G(G)^+} = \frac{G^+}{Z(G)^+} \end{aligned}$$

Nach § 5 wissen wir, dass für Raumgruppen G zusätzlich gilt:

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad C_A(G) &= C_A(G)^+ = C_E(G) = C_E(G)^+ \stackrel{\text{def}}{=} C(G) \\ \text{(ii)} \quad Z(G) &= Z(G)^+ \end{aligned}$$

Wir haben also

$$\begin{aligned} \text{Aut}(G) &\cong \frac{N_A(G)}{C(G)} & ; & \quad \text{Aut}^+(G) \cong \frac{N_A(G)^+}{C(G)} \\ \text{Iso Aut}(G) &\cong \frac{N_E(G)}{C(G)} & ; & \quad \text{Iso Aut}^+(G) \cong \frac{N_E(G)^+}{C(G)} \\ \text{Int}(G) &\cong \frac{G}{Z(G)} & ; & \quad \text{Int}^+(G) \cong \frac{G^+}{Z(G)} \end{aligned}$$

Gilt überdies $N_A(G) = N_E(G)$ (z.B. für alle wirteligen und kubischen Raumgruppen), so hat man entsprechend

$$\text{Aut}(G) = \text{Iso Aut}(G) \quad \text{und} \quad \text{Aut}^+(G) = \text{Iso Aut}^+(G).$$

Wir wollen uns nun diesen Faktorgruppen zuwenden. Es wird sich zeigen, dass wir bei Raumgruppen die Automorphismengruppen immer durch eine Gruppe von Transformationen darstellen können, welche sich sehr einfach aus den entsprechenden Normalisatorgruppen ableiten lässt.

Satz Bei Raumgruppe G zerfällt $N_A(G)$ über $C(G)$ in ein semidirektes Produkt: Es existiert eine Untergruppe $N_A^0(G)$ von $N_A(G)$

- mit $N_A(G) = C(G) \rtimes N_A^0(G)$

Beweis Nach § 5 liefert $C(G)$ eine Zerlegung des Vektorraums aller Translationen in eine orthogonale Summe $C(G) \oplus C(G)^\perp$, z.B. in KOO $\oplus$ OKK. Diese Zerlegung ist invariant unter allen Transformationen von $\tilde{G}$. Entsprechend dieser Zerlegung hat jedes Element (A, a) von $N_A(G)$ genau eine Darstellung als Produkt $(1, c) \cdot (A, a')$ mit $(1, c) \in C(G)$ und $(1, a') \in C(G)^\perp$. Wir zeigen nun, dass die Menge aller solcher Elemente (A, a') die gesuchte Untergruppe $N_A^0(G)$ bildet.

Sicher enthält diese Menge das Neutralelement und mit jedem Element auch sein Inverses. Wir müssen also noch zeigen, dass die Menge abgeschlossen ist gegenüber Produktbildungen.

Seien (A, a') und (B, b') in $N_A^0(G)$. Dann sind also $(1, a')$ und $(1, b')$ beide in $C(G)^\perp$, somit auch $(1, a') \cdot (1, A(b')) = (1, a' + A(b'))$, da $C(G)^\perp$ invariant ist unter $\tilde{G}$. Dann ist aber $(A, a') \cdot (B, b') = (A, a' + A(b'))$ in $N_A^0(G)$, wenn $(1, a' + A(b'))$ in $C(G)^\perp$ ist.

Das Produkt der beiden Untergruppen $C(G)$ und $N_A^0(G)$ von $N_A(G)$ ist sicher ein semidirektes, da ihr Durchschnitt aus 1_G besteht und da $C(G) = C_A(G)$ normal ist in $N_A(G)$ (etwa als Kern von $\tilde{\pi}$, vgl. Abschnitt 1.4).

□

Beispiel

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

falls etwa $C(G) = \text{OOK}$

$N_A(G)$ ist also darstellbar als semidirektes Produkt der normalen Untergruppe $C(G)$ und einer Untergruppe $N_A^0(G)$, der all diejenigen Matrizen der Gestalt (A, a') entsprechen:

$$N_A(G) = C(G) \ltimes N_A^0(G)$$

Analog gilt $N_E(G) = C(G) \ltimes N_E^0(G)$, und es ist $N_E^0(G) = N_A^0(G) \cap E$

Damit haben wir aber bereits die Transformationsgruppen, welche die Automorphismengruppen $\text{Aut}(G)$ und $\text{Iso Aut}(G)$ darstellen:

$$\begin{aligned} \text{Aut}(G) &\cong \frac{N_A(G)}{C(G)} = \frac{C(G) \ltimes N_A^0(G)}{C(G)} \cong N_A^0(G) \\ \text{Iso Aut}(G) &\cong \frac{N_E(G)}{C(G)} = \frac{C(G) \ltimes N_E^0(G)}{C(G)} \cong N_E^0(G) = N_A^0(G) \cap E \end{aligned}$$

Diese Transformationsgruppen liefern eine eindeutige und ausserordentlich nützliche Darstellung der Automorphismengruppen:

Transformationsgruppen sind "vertraut", wir leiten aus dem Symbol von $N_A(G)$ auch sofort das Symbol von $N_A^0(G)$ ab. Wir können diese Gruppen also auch leicht notieren.

Wir erhalten sofort eine Matrixdarstellung der Transformationsgruppen in einer Basis von G und können damit die Automorphismen von G auch effektiv berechnen (für jeden Automorphismus γ von G ist $\gamma(g) = a \cdot g \cdot a^{-1}$ für genau ein $a \in N_A^0(G)$).

Ein weiterer Vorteil ist, dass wir die Darstellung der Automorphismen⁺-Gruppen sofort aus der Darstellung der vollen Automorphismengruppe erhalten:

$$\text{Aut}^+(G) \cong \frac{N_A(G)^+}{C(G)} = \frac{C(G) \rtimes N_O(G)^+}{C(G)} \cong N_O(G)^+ \\ = [\text{Darstellung von Aut}(G)]^+$$

$$\text{Iso Aut}^+(G) \cong \frac{N_E(G)^+}{C(G)} = \frac{C(G) \rtimes N_O^E(G)^+}{C(G)} \cong N_O^E(G)^+ \\ = [\text{Darstellung von Iso Aut}(G)]^+$$

Beispiel 1 Wir betrachten eine Raumgruppe G vom Typ Pmm2 = DDD mm2.

Es ist

$$\text{Aut}(G) \cong \frac{N_A(G)}{C(G)} = \frac{D_2 D_2 K \begin{smallmatrix} '4 & 2 & 2' \\ m & m & m \end{smallmatrix}}{OOK \ 111} \\ \cong \frac{OOK \ 111 \rtimes D_2 D_2 O \begin{smallmatrix} '4 & 2 & 2' \\ m & m & m \end{smallmatrix}}{OOK \ 111} \cong D_2 D_2 O \begin{smallmatrix} '4 & 2 & 2' \\ m & m & m \end{smallmatrix}$$

$$\text{Iso Aut}(G) \cong \frac{N_E(G)}{C(G)} = \frac{D_2 D_2 K \begin{smallmatrix} 2 & 2 & 2 \\ m & m & m \end{smallmatrix}}{OOK \ 111} \\ = \frac{OOK \ 111 \rtimes D_2 D_2 O \begin{smallmatrix} 2 & 2 & 2 \\ m & m & m \end{smallmatrix}}{OOK \ 111} \cong D_2 D_2 O \begin{smallmatrix} 2 & 2 & 2 \\ m & m & m \end{smallmatrix}$$

$$\text{Daraus} \quad \text{Aut}^+(G) \cong \left[D_2 D_2 O \begin{smallmatrix} '4 & 2 & 2' \\ m & m & m \end{smallmatrix} \right]^+ = D_2 D_2 O \ '422'$$

$$\text{und} \quad \text{Iso Aut}^+(G) \cong \left[D_2 D_2 O \begin{smallmatrix} 2 & 2 & 2 \\ m & m & m \end{smallmatrix} \right]^+ = D_2 D_2 O \ 222$$

$$\left(= D_2 D_2 O \ '422' \cap E \right)$$

Beispiel 2 $G = B_m \quad \text{Aut}(G) \cong \frac{N_A(G)}{C(G)} = \frac{KKD_2 \text{ Zyl } B}{KKO \ 111} \cong OOD_2 \text{ Zyl } B$

$\text{Iso Aut}(G) \cong \frac{N_E(G)}{C(G)} = \frac{KKD_2 \ 11 \ \frac{2}{m}}{KKO \ 111} \cong OOD_2 \ 11 \ \frac{2}{m}$

und damit $\text{Aut}^+(G) \cong OOD_2 \text{ Zyl } B^+$

und $\text{Iso Aut}^+(G) \cong OOD_2 \ 112$

Beispiel 3 $G = P \ \bar{4} \ b \ 2 = DDD(P) \ \bar{4} \ b \ 2$

$\text{Aut}(G) \cong \frac{N_A(G)}{C(G)} = \frac{DDD(C) \ \frac{4}{m} \ \frac{2}{m} \ \frac{2}{m}}{OOO \ 111}$

$\cong DDD(C) \ \frac{4}{m} \ \frac{2}{m} \ \frac{2}{m} = M(DDD)(P) \ \frac{4}{m} \ \frac{2}{m} \ \frac{2}{m}$

mit $M = \begin{bmatrix} 1/2 & -1/2 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{bmatrix}$. Wegen $N_A(G) = N_E(G)$ ist

auch $\text{Aut}(G) = \text{Iso Aut}(G)$. Wir haben

$\text{Aut}^+(G) = \text{Iso Aut}^+(G) = \left[M(DDD)(P) \ \frac{4}{m} \ \frac{2}{m} \ \frac{2}{m} \right]^+$

$= M(DDD)(P) \ 422$.

Beispiel 3 zeigt den häufigen Fall, wo $C(G)$ trivial ist (d.h. $C(G) = OOO$) und daher auch die Zerlegung von $N_A(G)$ trivial ist:

$$N_A(G) = C(G) \times N_A(G), \text{ also } N_A(G) = N_O(G)$$

$\text{Aut}(G)$ wird dann durch $N_A(G)$ selbst dargestellt.

Wir wollen uns jetzt noch dem etwas komplizierteren Fall der inneren Automorphismen zuwenden.

G lässt sich im allgemeinen nicht in ein semidirektes Produkt nach $Z(G)$ zerlegen, da auch translative Anteile in der Richtung von $Z(G)$ auftreten können, die nicht selbständig als Translationen in $Z(G)$ liegen:

Betrachten wir eine Raumgruppe vom Typ $G = B2 = DDD(B)112$.
 Es ist $Z(G) = OOD(P) = OOD$. Eine Untergruppe K von G ,
 welche die Bedingung

$$G = Z(G) \rtimes K \quad (*)$$

erfüllt, müsste klassengleich zu G sein. K müsste also
 vom Typ $OOO 112$, $OOD 112$, $DOO 112$, $DDO 112$, $DDD(P) 112$
 oder $DDD(B) 112$ sein. Aber Untergruppen vom Typ $OOD 112$,
 $DDD(P) 112$ und $DDD(B) 112$ haben nichttrivialen Durchschnitt
 mit $Z(G)$, und für Untergruppen K von den andern Typen gilt
 $Z(G) \rtimes K \neq G$. Es gibt also keine Untergruppe K von G ,
 welche der Bedingung $(*)$ genügt.

Wir wissen aber, dass die Translation $\frac{1}{2} \cdot \vec{c}$ mit allen Ele-
 menten von G kommutiert (sie liegt ja in $C(G)$) und des-
 halb nichts zu einem Automorphismus von G beiträgt. Wir
 können also alle translativen Anteile in der (den) Richtung(en)
 von $C(G)$ null setzen und erhalten dann aus G eine
 abgeleitete Gruppe G^0 , die keine Untergruppe von G zu
 sein braucht, die aber gerade der Gruppe $Int(G)$ entspricht.

In unserem Beispiel: $DDD(B)112 \longrightarrow D_2DO(P) 112$. Der Anteil
 der B-Zentrierung in der $\vec{c}$ -Richtung, der Richtung von $C(G)$,
 verschwindet, während der andere Anteil als Halbierung der
 $\vec{a}$ -Translation auftaucht.

Betrachten wir einige weitere Beispiele:

Beispiel 4 $G = P 2_1 = DDD 112_1$

$$\text{Es ist } Int(G) \cong \frac{DDD 112_1}{OOD 111} \cong DDO 112$$

Der Gleitanteil der 2_1 -Achse verschwindet,
 da er in der Richtung von $C(G)$ liegt.

Beispiel 5 $G = I \text{ ba}2.$

$$\text{Int}(G) \stackrel{\sim}{=} \frac{\text{DDD}(I) \text{ ba}2}{\text{OOD}(P) \text{ III}} \stackrel{\sim}{=} \text{DDO}(C) \text{ ba}2 = \text{DDO}(C) \text{ mm}2.$$

Der $\vec{C}$ -Anteil der I-Zentrierung verschwindet und es bleibt eine C-Zentrierung übrig. Das Normal-symbol von $\text{DDO}(C) \text{ ba}2$ ist also $\text{DDO}(C) \text{ mm}2.$

Man wäre direkt darauf gestossen, wenn man von der Aufstellung $I \text{ cc}2$ ausgegangen wäre.

Für alle Raumgruppen G mit $Z(G) = C(G) = \text{OOO}$ hat man natürlich wieder $\text{Int}(G) \cong G$ und $\text{Int}^+(G) \cong G^+$

Für die Umformung der auftretenden Faktorgruppen können wir also folgendes saloppe Schema angeben:

1. Streiche die im Nenner auftretenden Buchstaben K resp. D sowohl dort als auch an der entsprechenden Stelle im Zähler und ersetze sie durch O. Der Nenner ist nun trivial und kann gestrichen werden.
2. Reduziere auch die evtl. vorhandene Zentrierung entsprechend.
3. Streiche im Punktanteil des Symbols alle Gleit- und Schraubanteile in Richtung des Zentralisators, d.h. setze sie gleich O.

Und eventuell noch

4. Bringe die aus 1 bis 3 hervorgegangene Translationsgruppe auf Normalgestalt.

Beispiel 6 $G = \text{Fdd}2. \text{Int}(G) \stackrel{\sim}{=} \frac{\text{DDD}(F) \text{ dd}2}{\text{OOD} \text{ III}}$

DDD wird nach 1. zu DDO, die F-Zentrierung nach 2. zu $D_2D_2O(P)$, und die d-Gleitspiegelebenen werden zu b- resp. a-Gleitspiegelebenen im neuen Translationsgitter. Wir erhalten so

$$\text{Int}(G) \stackrel{\sim}{=} D_2D_2O \text{ ba}2.$$

Die Gruppen $\text{Aut}(G)$, $\text{Iso Aut}(G)$ und $\text{Int}(G)$ sind für alle dreidimensionalen Raumgruppen in der Tabelle 9.2 wie hier als Transformationsgruppen dargestellt. Durch den Uebergang zur $^+$ -Gruppe erhält man daraus wie gezeigt auch Darstellungen von $\text{Aut}^+(G)$, $\text{Iso Aut}^+(G)$ und $\text{Int}^+(G)$. Unsere Darstellung der Automorphismengruppen durch Transformationsgruppen ist eindeutig und hat die oben erwähnten Vorteile. Als letzten Vorteil möchten wir noch erwähnen, dass diese Transformationsgruppen alle Untergruppenbeziehungen der Automorphismengruppen genau widerspiegeln und sich so z.B. der Index einer Automorphismengruppe in einer anderen leicht ablesen lässt.

Wir wollen das auch anhand zweier Beispiele illustrieren:

Beispiel 7 Betrachten wir wieder $G = \text{Pmm}2$ (siehe auch Beispiel 1). Wir haben $\text{Aut}(G) \cong D_2 D_2 O \begin{smallmatrix} '4 & 2 & 2' \\ m & m & m \end{smallmatrix}$;
 $\text{Iso Aut}(G) \cong D_2 D_2 O \begin{smallmatrix} 2 & 2 & 2 \\ m & m & m \end{smallmatrix}$; $\text{Int}(G) = \text{DDO } mm2$
 und daraus
 $\text{Aut}^+(G) \cong D_2 D_2 O \text{ '422'}$; $\text{Iso Aut}^+(G) \cong D_2 D_2 O \text{ 222}$;
 $\text{Int}^+(G) \cong \text{DDO } 112$. Der Index von $\text{Int}(G)$ in $\text{Iso Aut}(G)$ ist offenbar $8=4 \cdot 2$, da der Index von DDO in $D_2 D_2 O$ 4 beträgt und $mm2$ von Index 2 in mmm ist. Ähnlich ist der Index von $\text{Iso Aut}(G)$ in $\text{Aut}(G)$ $2=1 \cdot 2$. Als Gesamtindex von $\text{Int}(G)$ in $\text{Aut}(G)$ ergibt sich somit 16.

Beispiel 8 Für kubische Raumgruppen hat man immer $C(G)=OOO$. Also für $G = P m3m$
 $\text{Aut}(G) \cong N_A(G) = N_E(G) = \text{DDD}(I) m3m \cong \text{Iso Aut}(G)$
 $\text{Int}(G) \cong G = \text{DDD}(P) m3m$

Der Index von $DDD(P) m3m$ in $DDD(I) m3m$ ist 2. Also ist jeder zweite Automorphismus ein innerer. Noch extremer verhält es sich bei den letzten beiden Raumgruppentypen 229 und 230 ($I m3m$ und $I a3d$). Es gilt dort

$$G = N_E(G) = N_A(G) \cong \text{Aut}(G) = \text{Iso Aut}(G) = \text{Int}(G)$$

Solche Gruppen, für die $G \cong \text{Int}(G) = \text{Aut}(G)$ gilt, heissen "vollständig".

§ 7 Charakteristische Untergruppen von Raumgruppen

7.1 Eine Einführung

Damit dieser § unabhängig von den übrigen gelesen werden kann, wollen wir die charakteristischen Untergruppen von Symmetriegruppen noch einmal definieren und einige elementare Eigenschaften besprechen. Dabei soll die Analogie zu den *normalen* (früher oft auch *invariant* genannten) Untergruppen hervorgehoben werden.

Definition 1 Sei G eine Symmetriegruppe, H eine Untergruppe von G .

- H heisst *charakteristische Untergruppe* von G , wenn jeder Automorphismus von G H auf sich selbst abbildet und damit einen Automorphismus von H induziert
- H heisst *normale Untergruppe* von G , wenn jeder *innere* Automorphismus von G H auf sich selbst abbildet und somit einen Automorphismus von H induziert.

Die charakteristischen Untergruppen H einer Symmetriegruppe G liegen also wie erratische Blöcke in G drin und werden durch Automorphismen von G nicht in G herumgeschoben. Dagegen sind die normalen Untergruppen nur *invariant* (als Ganzes) gegenüber inneren Automorphismen. "Gewöhnliche" Untergruppen brauchen nicht einmal durch innere Automorphismen auf sich selbst abgebildet zu werden.

Offenbar ist jede charakteristische Untergruppe auch *normal*.

Zur Notation: Ist H eine charakteristische Untergruppe von G , so schreiben wir

$$H \triangleleft G$$

Lemma 1 Seien H und K charakteristische Untergruppen von G . Dann gilt

- (i) $H \cap K \trianglelefteq G$
- (ii) Die von $H \cup K$ erzeugte Untergruppe
ist charakteristisch in G

Für beliebige Gruppen H , K und G gilt weiter die Implikation

- (iii) $H \trianglelefteq K$ und $K \trianglelefteq G \implies H \trianglelefteq G$

Sind also H und K charakteristische Untergruppen von G , so ist auch ihr Durchschnitt eine charakteristische Untergruppe von G . Ebenso ist auch die kleinste Untergruppe von G , welche H und K enthält, charakteristisch in G . Und wenn K eine charakteristische Untergruppe von G ist, so sind auch alle charakteristischen Untergruppen von K charakteristisch in G .

Die Beweise für die drei Behauptungen ergeben sich unmittelbar aus den Definitionen. Während analoge Behauptungen zu (i) und (ii) auch für normale Untergruppen gelten, wäre (iii) für normale Untergruppen falsch. So ist etwa die Untergruppe 2_x normal in 222 (diese Gruppe ist ja kommutativ), und 222 ist normal in 23 . 2_x ist aber in 23 konjugiert zu den Untergruppen 2_y und 2_z .

Lemma 1 zeigt uns, wie wir zu bekannten charakteristischen Untergruppen einer Gruppe weitere finden: Als Durchschnitte, als Erzeugnis von Vereinigungen sowie dadurch, dass wir auch die charakteristischen Untergruppen der charakteristischen Untergruppen hinzunehmen. Das nächste Lemma garantiert uns, dass wir in jeder Symmetriegruppe überhaupt charakteristische Untergruppen finden:

Lemma 2 Sei G eine Symmetriegruppe. Dann sind die folgenden Untergruppen von G charakteristisch:

- (i) 1_G und G selber, also die trivialen Untergruppen
- (ii) G^+ , also die Untergruppe aller direkten Transformationen in G ($\det = +1$)

- (iii) Γ_G , die Untergruppe aller Translationen
in G
- (iv) $Z(G)$, das Zentrum von G
- (v) $G', G'', \dots$, die Kommutatorgruppe oder
abgeleitete Gruppe von G und weiter deren
Kommutatorgruppen *)

Zum Beweis: (i), (iv) und (v) gelten für beliebige Gruppen.

- ad (ii): Wegen $\det(a \cdot g \cdot a^{-1}) = \det(g)$ werden
Transformationen mit positiver Deter-
minante auf ebensolche abgebildet
- ad (iii): Translationen werden wieder auf Trans-
lationen abgebildet, somit $\mathfrak{V}(\Gamma_G) \subset \Gamma_G$
nebst $\mathfrak{V}^{-1}(\Gamma_G) \subset \Gamma_G$ für alle $\mathfrak{V} \in \text{Aut}(G)$

Lemma 1 und 2 liefern uns nun zu jeder Symmetriegruppe G
einen Strauss von charakteristischen Untergruppen:

- Wir nehmen $G^+, \Gamma_G, Z(G)$ und G' her nebst G
und L_G
- Wir bilden die Durchschnitte und Erzeugnisse von
Vereinigungen

Dergestalt erhalten wir einen *Unterverband* $\mathfrak{C}(G)$ des Verbandes
aller charakteristischen Untergruppen von G , der etliche
und vor allem wichtige charakteristische Untergruppen enthält.
Diesen Verband wollen wir für Raumgruppen im folgenden
bestimmen.

- *) Die Kommutatorgruppe G' einer Gruppe G ist charakteri-
siert als die kleinste Untergruppe von G mit der
Eigenschaft, dass G/G' abelsch ist. Es gilt also

$$G/H \text{ abelsch} \implies G' \subset H$$

Eine andere, ausführlichere Einführung dieser Gruppe
findet sich in Abschnitt 2.5 dieser Arbeit.

7.2 Die kanonischen charakteristischen Untergruppen von Raumgruppen

Wir wollen für eine beliebige Raumgruppe G den kleinsten Verband $\mathcal{C}(G)$ von charakteristischen Untergruppen bestimmen, der folgende Eigenschaften hat:

- G und $1_G \in \mathcal{C}(G)$
- G^+, G', Γ_G und $Z(G) \in \mathcal{C}(G)$
- Sind H und K in $\mathcal{C}(G)$, so sollen auch $H \cap K$, der Durchschnitt von H und K sowie $\langle H \cup K \rangle$, das Erzeugnis von H und K in $\mathcal{C}(G)$ liegen.

Um den Verband noch etwas abzurunden wollen wir noch die folgende Untergruppe von G hinzunehmen:

$$Z(G)^{\perp} = \{t \in \Gamma_G \mid t \perp s \text{ für alle } s \text{ in } Z(G)\}$$

$Z(G)^{\perp}$ ist also die Untergruppe aller Translationen in Γ_G , welche senkrecht stehen auf $Z(G)$. Dass es von Vorteil ist, diese Gruppe hinzuzunehmen, zeigt die Gestalt von $\mathcal{C}(G)$ (siehe Satz 5) hinreichend. Dass wir mit $Z(G)^{\perp}$ aber überhaupt eine charakteristische Untergruppe von G in unseren Verband einbauen, muss zuerst noch gezeigt werden.

Lemma 3 Sei G eine Raumgruppe. Dann ist $Z(G) \subset \Gamma_G$, und $Z(G)^{\perp} = \{t \in \Gamma_G \mid t \perp s \text{ für alle } s \text{ in } Z(G)\}$ ist wohldefiniert als Untergruppe von Γ_G . Behauptung: $Z(G)^{\perp}$ ist eine charakteristische Untergruppe von G .

Beweis $Z(G)$ spannt einen Teilraum T_1 des reellen Vektorraums T aller Translationen auf. Es ist $Z(G) \subset T_1$ und $Z(G)^{\perp} \subset T_1^{\perp}$ (beachte: $Z(G)^{\perp}$ ist nicht der Orthogonalraum von $Z(G)$ in T , sondern dessen Durchschnitt mit Γ_G !). Jedes g in $\mathcal{G}$ zerlegt den

Raum T in eine Summe $T = T_g \oplus T_g^\perp$
 wo T_g der Eigenraum von g zum Eigenwert 1 ist.
 Nach § 5 gilt $T_1 = \bigcap_{g \in \tilde{G}} T_g$, $g \in \tilde{G}$
 Für jedes $a \in \widetilde{N_A(G)}$ gilt (vgl. Satz 1 in § 3)
 $a(T_g) = T_{aga^{-1}} = T_h$ nebst $a(T_g^\perp) = T_h^\perp$
 Daraus ergibt sich

$$a(T_1) = a\left(\bigcap_{g \in \tilde{G}} T_g\right) = \bigcap_{g \in \tilde{G}} T_{aga^{-1}} = T_1$$

und

$$a(T_1^\perp) = a\left(\sum_{g \in \tilde{G}} T_g^\perp\right) = \sum_{g \in \tilde{G}} T_{aga^{-1}}^\perp = T_1^\perp$$

Damit gilt aber für jedes a in $\widetilde{N_A(G)}$ wegen $Z(G)^\perp \subset T_1^\perp$

$$a(Z(G)^\perp) \subset a(T_1^\perp) = T_1^\perp$$

und somit wegen $Z(G) \subset T_1$

$$a(Z(G)^\perp) \perp Z(G), \text{ also } a(Z(G)^\perp) \subset Z(G)^\perp$$

Dasselbe gilt aber für a^{-1} , und daher gilt also

$$\text{für jedes } a \text{ in } \widetilde{N_A(G)} \quad a(Z(G)^\perp) = Z(G)^\perp$$

Demnach ist also $Z(G)^\perp$ unter allen Automorphismen von G invariant. □

$Z(G)$ ist also eine charakteristische Untergruppe von G .

Wir möchten sie in unseren Verband $\mathfrak{C}(G)$ einbauen, weil

sie als Untergruppe von Γ_G augenfälliger ist als

$\Gamma_{G'} = \Gamma_G \cap G'$, weil sie $\Gamma_{G'}$ enthält (siehe Lemma 4) und

weil sie zusammen mit $Z(G)$ häufig diejenige Untergruppe von

Γ_G erzeugt, welche man durch Weglassen der Zentrierungs-

translationen in Γ_G erhält (also $DDD(P)$ im dreidimensionalen Fall).

Das nächste Lemma gibt uns einige Anhaltspunkte für die

Berechnung der Kommutatorgruppe G' von Raumgruppen G :

Lemma 4 Sei G eine Raumgruppe. Dann gilt

- (i) $\widetilde{G'} = \widetilde{G'}$, d.h. die Punktgruppe der Kommutatorgruppe G' ist identisch mit der Kommutatorgruppe der Punktgruppe $\tilde{G}$ von G
- (ii) $\Gamma_{G'} \subset Z(G)^\perp$, d.h. die Translationen in G' liegen alle in $Z(G)^\perp$.

Lemma 4 könnten wir, wie Satz 1 in § 5, etwas allgemeiner formulieren. G braucht nicht unbedingt eine diskrete Raumgruppe zu sein, wichtig ist, dass Γ_G n linear unabhängige Translationen enthält, also dass das Buchmann-Symbol von Γ_G den Buchstaben 0 nicht enthält.

Nun zum Beweis von Lemma 4 :

Wir betrachten einen beliebigen Kommutator in G. Seien (R,r) und (S,s) also Elemente von G.

$$\begin{aligned} (R,r) \cdot (S,s) \cdot (R,r)^{-1} \cdot (S,s)^{-1} &= \\ &= (R,r) \cdot (S,s) \cdot (R^{-1}, -R^{-1}(r)) \cdot (S^{-1}, -S^{-1}(s)) = \\ &= (R \cdot S, r + R(s)) \cdot (R^{-1} \cdot S^{-1}, -R^{-1}(r) - R^{-1} \cdot S^{-1}(s)) = \\ &= (R \cdot S \cdot R^{-1} \cdot S^{-1}, r + R(s) - R \cdot S \cdot R^{-1}(r) - R \cdot S \cdot R^{-1} \cdot S^{-1}(s)) \end{aligned}$$

Die Punkttransformation ist offenbar ein Kommutator von $\tilde{G}$, und die Behauptung (i) ist klar.

Den translativen Anteil zerlegen wir in zwei Summanden:

$$\begin{aligned} r - R \cdot S \cdot R^{-1}(r) &= r - F(r) \quad \text{für } F = R \cdot S \cdot R^{-1} \in \tilde{G} \\ R(s) - R \cdot S \cdot R^{-1} \cdot S^{-1}(s) &= R(s) - R \cdot S \cdot R^{-1} \cdot S^{-1} \cdot R^{-1} \cdot R(s) = \\ &= s' - H(s') \quad \text{für } H = R \cdot S \cdot R^{-1} \cdot S^{-1} \cdot R^{-1} \in \tilde{G} \end{aligned}$$

Wir zeigen nun, dass alle Vektoren der Gestalt $t - F(t)$, mit $F \in \tilde{G}$, senkrecht stehen auf $Z(G)$. Dann ist der Beweis fertig, da wir dann wissen, dass der translative Anteil eines beliebigen Kommutators immer senkrecht steht auf $Z(G)$.

$Z(G)$ definiert eine orthogonale Zerlegung des Raums T aller Translationen in $T = T_1 \oplus T_1^\perp = T_1 \oplus T_2$ sodass $Z(G) \subset T_1$ gilt. Diese Zerlegung haben wir schon im Beweis von Lemma 3 angetroffen. Sie ist invariant unter $\widetilde{N_A(G)}$, also erst recht unter $\tilde{G}$. Gemäss dieser Zerlegung zerfällt jede Translation t in eine Summe $t_1 + t_2$ mit $t_1 \in T_1$ und $t_2 \in T_2$. Es ist nun

$$\begin{aligned} t - F(t) &= (t_1 + t_2) - F(t_1 + t_2) = \\ &= t_1 - F(t_1) + t_2 - F(t_2) \end{aligned}$$

t_1 liegt aber in T_1 , also im Eigenraum zum Eigenwert 1 für alle Elemente F in $\tilde{G}$. Es ist also $t_1 - F(t_1) = 0$!

Also ist $t - F(t) = t_2 - F(t_2) \in T_2$

Damit ist aber die Behauptung $t - F(t) \perp Z(G)$ bewiesen.

□

Das folgende Beispiel zeigt noch, dass Γ_G , im allgemeinen eine echte Untergruppe von $Z(G)^\perp$ ist:

Beispiel 5

$$G = P2 = DDD \ 112$$

Es ist $Z(G) = OOD \ 111$, somit $Z(G)^\perp = DDO \ 111$

$\widetilde{G}' = 1$, also $\widetilde{G} = 1$ und $G' = \Gamma_G$.

Seien nun $2_\alpha, 2_\beta$ beliebige Digyren in G :

$$2_\alpha \cdot 2_\beta \cdot 2_\alpha^{-1} \cdot 2_\beta^{-1} = 2_\alpha \cdot 2_\beta \cdot 2_\alpha \cdot 2_\beta$$

$2_\alpha \cdot 2_\beta$ ist aber eine beliebige Translation in

$Z(G)^\perp$, also ist $2_\alpha \cdot 2_\beta \cdot 2_\alpha \cdot 2_\beta = t + t$ mit

$t \in Z(G)^\perp$.

Translationen in G kommutieren, und wir brauchen daher nur noch Kommutatoren der Art $2_\alpha \cdot t \cdot 2_\alpha \cdot t^{-1}$ zu untersuchen:

$$2_\alpha \cdot t \cdot 2_\alpha \cdot t^{-1} = 2_\alpha \cdot (t \cdot 2_\alpha \cdot t) = 2_\alpha \cdot 2_\beta, \text{ wo die}$$

Achsen von 2_α und 2_β um eine Translation t in

$Z(G)^\perp$ auseinanderliegen. Aber dann ist

$$2_\alpha \cdot 2_\beta = t + t \text{ mit } t \in Z(G)^\perp.$$

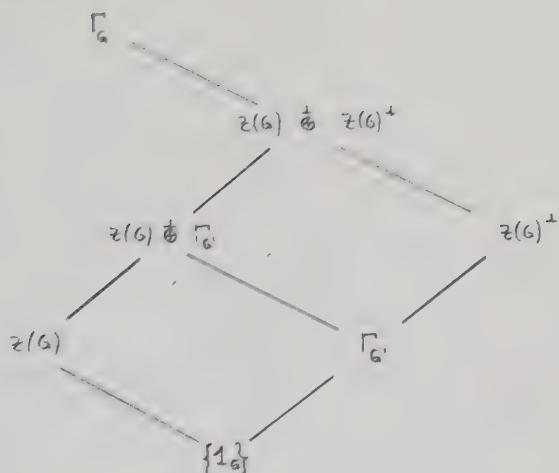
Damit ist gezeigt:

$$G' = \Gamma_G = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot DDO \not\subseteq DDO = Z(G)^\perp$$

Wir haben bis jetzt für unseren Verband $\mathcal{C}(G)$ die folgenden charakteristischen Translationsgruppen gefunden:

$$\Gamma_G, Z(G), Z(G)^\perp, \Gamma_G$$

Wollen wir auch Durchschnitte und Erzeugnisse von Vereinigungen dabei haben, so erhalten wir folgenden Teilverband von $\mathcal{C}(G)$ (aufsteigende Striche bedeuten dabei "ist Untergruppe von"):

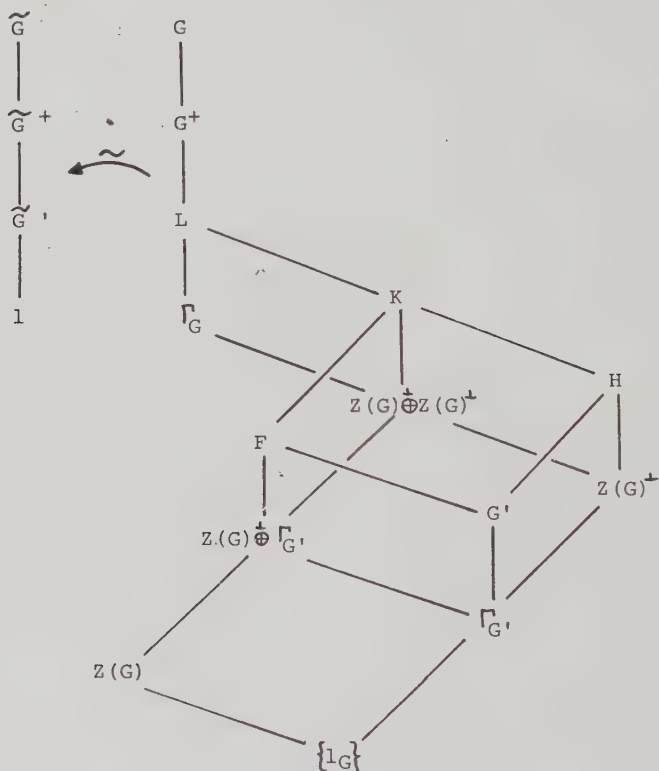


Die einzige nichttriviale Untergruppenbeziehung (nämlich $\Gamma_G \subset Z(G)^+$, sehen wir in Lemma 4 bewiesen. Häufig fallen für bestimmte Gruppen G einige dieser Translationsgruppen zusammen, doch werden wir auch Beispiele antreffen, wo alle diese Translationsgruppen verschieden sind.

Nach diesen Vorbereitungen beschreiben wir nun die allgemeine Gestalt von $C(G)$ im folgenden Satz 5 . Dabei sei nochmals erwähnt, dass wir uns in diesem Abschnitt keineswegs auf dreidimensionale Raumgruppen beschränken.

Satz 5

Der Verband $\mathfrak{L}(G)$ hat für Raumgruppen G maximal die folgende Gestalt:



Man sollte diesen Verband räumlich sehen. Seine vier Stockwerke entsprechen dann einem Verband $\tilde{\mathfrak{L}}$ der Punktgruppen, den die Projektion $\sim$ aus $\mathfrak{L}(G)$ liefert (diese Projektion wird in Abschnitt 2.1 ausführlich beschrieben). Die Untergruppenbeziehungen innerhalb der einzelnen Stockwerke sind also *klassengleich*.

Den untersten Stock von $\mathfrak{L}$ kennen wir bereits (siehe S.87). Die horizontale Anordnung entspricht also unserem Teil-

verband charakteristischer Translationsuntergruppen. Senkrechte Linien von einem Stockwerk zum anderen sollen demnach *translationengleiche* Untergruppenbeziehungen markieren.

Den Rest dieses Abschnitts verwenden wir auf den Beweis von Satz 5. Wir werden dazu einige wichtige Sätze über Untergruppen von Symmetriegruppen verwenden, die wir hier auch gleich formulieren und beweisen wollen.

Wir müssen z.B. zeigen, dass eine Untergruppe L von G existiert mit $\Gamma_L = \Gamma_G$ und $\tilde{L} = \tilde{G}$, dass diese Untergruppe eindeutig bestimmt ist und dass sie charakteristisch ist.

Der folgende allgemeine Satz von C. Hermann löst das Problem:

Satz 6 Sei G eine Symmetriegruppe, $\tilde{B}$ eine Untergruppe von $\tilde{G}$. Dann existiert genau eine Untergruppe H von G mit $\Gamma_H = \Gamma_G$ und $\tilde{H} = \tilde{B}$, sodass das folgende Diagramm kommutiert:

$$\begin{array}{ccccc}
 \Gamma_G & \xrightarrow{i} & G & \xrightarrow{\sim} & \tilde{G} \\
 \uparrow \text{id} & & \uparrow i & & \uparrow i \\
 \Gamma_H & \xrightarrow{i} & H & \xrightarrow{\sim} & \tilde{H}
 \end{array}$$

(i für die Inklusion, id für die Identität)

Satz 6 besagt also, dass zu jeder Untergruppe F der Punktgruppe von G genau eine translationengleiche Untergruppe von G existiert, welche durch $\sim$ auf F projiziert wird.

Beweis Wir definieren $H = \{(s, s) \in G \mid s \in \tilde{B}\}$. H ist sicher eine Untergruppe von G mit $\Gamma_H = \Gamma_G$ (wegen $1\tilde{G} \in \tilde{B}$). Es gilt $\tilde{H} = \tilde{B}$ nach Konstruktion. Jede weitere Untergruppe H_0 , welche den Bedingungen von Satz 6 genügt, ist aber eine translationen- und klassengleiche Untergruppe von H , mithin gilt

gilt $H = H_0$. H ist also durch die Bedingungen von Satz 6 eindeutig charakterisiert. $\square$

Aus Satz 6 ziehen wir noch das

Korollar 7 Sei G eine Symmetriegruppe. Dann existiert zu jeder charakteristischen Untergruppe $\tilde{B}$ von $\tilde{G}$ genau eine charakteristische Untergruppe H von G mit $\tilde{H} = \tilde{B}$ und $\Gamma_H = \Gamma_G$.

Beweis Existenz und Eindeutigkeit gehen aus Satz 6 hervor. Wir müssen noch zeigen, dass H charakteristisch ist in G . Für jeden Automorphismus $\mathfrak{V}$ von G ist $\mathfrak{V}(H)$ wieder eine Untergruppe von G . Wegen $\Gamma_H = \Gamma_G$ gilt auch $\Gamma_{\mathfrak{V}(H)} = \mathfrak{V}(\Gamma_H) = \mathfrak{V}(\Gamma_G) = \Gamma_G$. H und $\mathfrak{V}(H)$ sind also translationengleich in G . Wäre $\tilde{H} \neq \tilde{\mathfrak{V}(H)}$, so fänden wir einen Automorphismus $\tilde{\mathfrak{V}}$ von $\tilde{G}$ mit $\tilde{\mathfrak{V}}(\tilde{H}) \neq \tilde{H}$ im Widerspruch dazu, dass $\tilde{H}$ charakteristisch ist in $\tilde{G}$. Nach Satz 6 müssen dann aber die translationengleichen Untergruppen H und $\mathfrak{V}(H)$ schon identisch sein. Also gilt für jeden Automorphismus von G $\mathfrak{V}(H) = H$, d.h. H ist charakteristisch in G . $\square$

Eine kleine Warnung: Wenn für zwei Untergruppen H und K von G gilt $\Gamma_H = \Gamma_K$ und $\tilde{H} = \tilde{K}$, so folgt daraus i.A. nicht, dass $H = K$ gilt. Dieser Schluss ist nur zulässig, wenn wie oben $\Gamma_H = \Gamma_K \stackrel{!}{=} \Gamma_G$ gilt, oder falls etwa zusätzlich bekannt ist, dass $H \subset K$ oder $K \subset H$ gilt. Satz 6 und Korollar 7 sind also vielleicht weniger trivial, als man auf den ersten Blick annehmen könnte.

Beispiel: Sei $G = B_2 = \text{DDD}(B)_2$. Die maximalen Untergruppen vom Typ P_2 und P_{2_1} sind offensichtlich nicht identisch, obwohl gilt $\Gamma_{P_{2_1}} = \text{DDD}(P) = \Gamma_{P_2}$ und $\tilde{P_2} = 2 = \tilde{P_{2_1}}$.

Zu $\tilde{G}$ kennen wir mindestens die charakteristischen Untergruppen $\tilde{G}$, $\tilde{G}^+$, $\tilde{G}'$ und $l_{\tilde{G}}$. Damit ist aber der Teil

$$\begin{array}{c} G \\ | \\ G^+ \\ | \\ L \\ | \\ \Gamma_G \end{array}$$

unseres Verbandes $\mathcal{U}(G)$ geklärt, nach Korollar 7 erhalten wir diesen Teilverband aus dem Verband der charakteristischen Untergruppen von $\tilde{G}$. Einzig "neu" ist die Gruppe L , sie ist also charakterisiert durch

$$L = \{(s, s) \in G \mid s \in \tilde{G}'\}$$

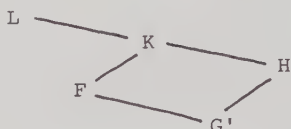
Zusammen mit Lemma 4 (i) ergibt sich daraus, dass G' eine klassengleiche Untergruppe von L ist. Damit ergibt sich auch, dass die Untergruppenbeziehungen innerhalb desselben Stockwerks immer klassengleich sind.

Als zweites Korollar zu Satz 6 können wir noch bequem den Satz von Hermann beweisen, dass jede Untergruppe einer Symmetriegruppe G klassengleiche Untergruppe einer zu G translationengleichen Zwischengruppe ist:

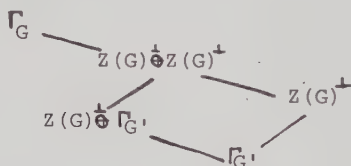
Korollar 8 (C. Hermann) Seien H und G Symmetriegruppen mit $H \subset G$. Dann existiert genau eine Zwischengruppe K mit $H \subset K \subset G$, so dass H eine klassengleiche Untergruppe von K und K eine translationengleiche Untergruppe von G ist.

Beweis Da H eine klassengleiche Untergruppe von K sein soll, muss $\tilde{H} = \tilde{K}$ gelten. Damit ist aber nach Satz 6 K als translationengleiche Untergruppe von G eindeutig charakterisiert. $\square$

Wir müssen jetzt noch die "Schicht"



in unseren Verband einbauen. Alle diese Gruppen sollen die Punktgruppe $\tilde{G}$ haben, und ihre Translationsgruppen sind durch den Verband



vorgegeben. Der folgende Satz charakterisiert uns die Gruppen F , H und K :

Satz 9 Sei H eine Symmetriegruppe, und es sei eine Translationsgruppe Γ gegeben mit $\Gamma_H \subset \Gamma$. Dann existiert genau dann eine Obergruppe G von H mit $\tilde{G} = \tilde{H}$ und $\Gamma_G = \Gamma$, wenn die folgende Bedingung erfüllt ist:

$$\tilde{H}(\Gamma) = \Gamma \quad (*)$$

G ist dann eindeutig bestimmt als internes Produkt $G = \Gamma \cdot H$ der Untergruppen von E .

Beweis $(*)$ ist sicher notwendig: falls G existiert, so operiert ja $\tilde{G}$ auf Γ_G mit $\tilde{G}(\Gamma_G) = \Gamma_G$. Es ist aber $\tilde{G} = \tilde{H}$ und $\Gamma_G = \Gamma$.

Wir wollen nun zeigen, dass G existiert. G soll Γ enthalten sowie Obergruppe von H sein. G muss also mindestens die Menge

$\Gamma \cdot H = \{t \cdot h \mid t \in \Gamma \text{ und } h \in H\} \subset E$ enthalten. Wir zeigen nun, dass diese Menge schon

eine Untergruppe von E ist.

- Ist $t \cdot h$ ein Element von $\Gamma \cdot H$, so auch $h^{-1}(-t) \cdot h^{-1}$, da mit t auch $-t$ und wegen (*) auch $h^{-1}(-t)$ in Γ liegt. Damit besitzt jedes Element ein Inverses.
- Sind $t_\alpha \cdot h_\alpha$ und $t_\beta \cdot h_\beta$ Elemente in $\Gamma \cdot H$, so auch ihr Produkt:

$$t_\alpha \cdot h_\alpha \cdot t_\beta \cdot h_\beta = t_\alpha \cdot (h_\alpha \cdot t_\beta) \cdot h_\beta = t_\alpha \cdot h_\alpha \cdot \overbrace{(t_\beta)}^{\in \Gamma!} \cdot h_\alpha \cdot h_\beta \in \Gamma \cdot H$$
 $\Gamma \cdot H \stackrel{\text{def}}{=} G$ ist also eine Obergruppe von H , und es gilt $\tilde{G} = \tilde{H}$ sowie $\Gamma_G = \Gamma$. □

In unserem Fall spielt G' die Rolle der kleinen Gruppe H , und die Translationsgruppen Γ , welche vorgegeben werden, sind

$$\Gamma_G, \quad Z(G) \dot{\oplus} Z(G)^\perp, \quad Z(G)^\perp, \quad Z(G) \dot{\oplus} \Gamma_G.$$

Für all diese Translationsgruppen ist (*) erfüllt inbezug auf $\tilde{G}'$, da sie ja charakteristisch sind in G ! Nach Satz 9 sind daher die Gruppen F , H , K und L eindeutig bestimmt:

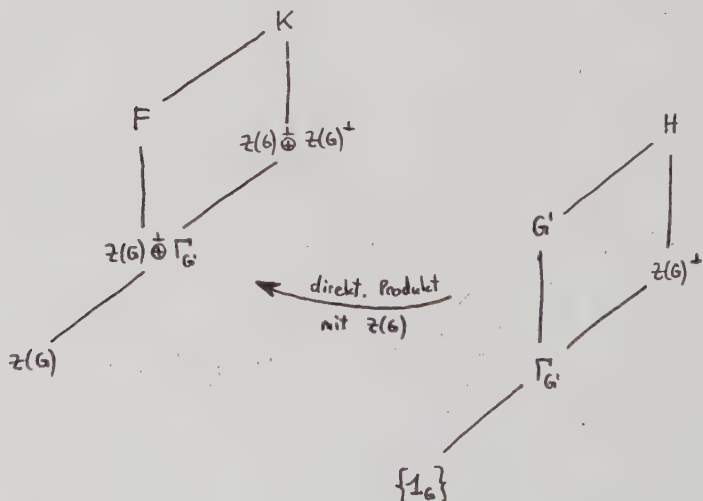
$$\begin{aligned} F &= [Z(G) \dot{\oplus} \Gamma_G] \cdot G' = Z(G) \rtimes G' \quad (\text{int.dir.Produkt}) \\ H &= Z(G)^\perp \cdot G' \\ K &= [Z(G) \dot{\oplus} Z(G)^\perp] \cdot G' = Z(G) \rtimes H \quad (\text{int.dir.Produkt}) \\ L &= \Gamma_G \cdot G' \end{aligned}$$

Alle in Satz 5 behaupteten Untergruppenbeziehungen sind nun unmittelbar aus den Definitionen ersichtlich und brauchen daher nicht speziell bewiesen zu werden. Dass die Untergruppen F , H , K und L charakteristisch sind, brauchen wir auch nicht zu beweisen: wir haben sie ja als Erzeugnis von Vereinigungen von charakteristischen Untergruppen von G erhalten (Lemma 1).

Damit ist bewiesen, dass der Verband $\mathfrak{C}(G)$ von Raumgruppen höchstens die Gestalt von Satz 5 annimmt. Zu jedem Paar von verschiedenen Gruppen im Verband $\mathfrak{C}(G)$ finden wir aber auch ein Beispiel, in welchem die beiden Gruppen tatsächlich verschieden sind (siehe Abschnitt 7.3). Der Verband $\mathfrak{C}(G)$ lässt sich also allgemein nicht weiter vereinfachen.

Noch etwas zu unserem Verband:

Das Produkt $F = Z(G) \cdot G'$ ist ein direktes. Es ist ja $Z(G) \cap G' = \{1_G\}$, und die Elemente von $Z(G)$ und G' kommutieren miteinander nach der Definition des Zentrums einer Gruppe. So erhalten wir den ganzen Teilverband zwischen $Z(G)$ und K als direktes Produkt von $Z(G)$ mit dem Teilverband zwischen $\{1_G\}$ und H :



7.3 Der Verband $\mathfrak{C}(G)$ bei den dreidimensionalen Raumgruppen

Im § 5 haben wir gesehen, dass das Zentrum einer Raumgruppe G eine Untergruppe von Γ_G ist und nur von der Punktgruppe $\tilde{G}$ abhängt. Bei den dreidimensionalen Raumgruppen können wir vier Fälle unterscheiden:

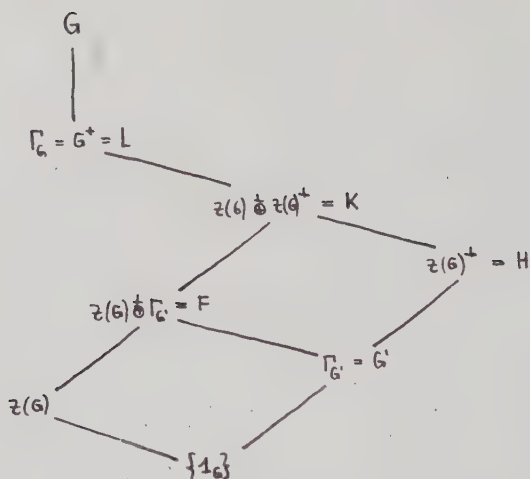
- (A) $Z(G) = \text{DDD}$ für $\tilde{G} = 1$
- (B) $Z(G) = \text{DDO}$ für $\tilde{G} = m$
- (C) $Z(G) = \text{OOD}$ für $\tilde{G} = 2, 3, 4, 6, 2mm, 3m, 4mm, 6mm$
- (D) $Z(G) = \text{OOO}$ für die restlichen Kristallklassen

Wir wollen nun untersuchen, welche maximale Gestalt unser Verband $\mathfrak{C}(G)$ in diesen vier Fällen besitzt.

- (A) Es ist $G = G^+ = \Gamma_G = Z(G)$, und der ganze Verband fällt zusammen zu

$$\begin{array}{c} G \\ | \\ \{1_G\} \end{array}$$

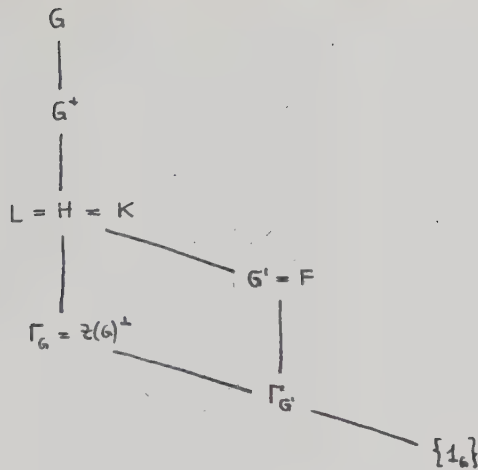
- (B) Für die Kristallklasse $\tilde{G} = m$ haben wir $\tilde{G}^+ = \tilde{G}' = 1$, also ist $\Gamma_G = L = G^+$. Die unteren drei Stockwerke unseres Verbandes fallen zusammen, und seine Maximalgestalt ist die folgende:



Beispiel 6 mit $G = \text{Pm}$ gehört in diese Gruppe.

- (C) In diesem Fall können wir $\mathcal{C}$ allgemein nicht weiter reduzieren. Tatsächlich tritt aber der ganze Verband (14 Elemente) bei keiner Raumgruppe auf (wohlgemerkt: jetzt sprechen wir nur noch von dreidimensionalen Raumgruppen !). Für spezielle Punktgruppen können wir aber $\mathcal{C}$ ähnlich wie in (A) und (B) gewaltig reduzieren.
Die Beispiele 7 und 8 vertreten diese Gruppe.

- (D) In diesem Fall ist $Z(G) = 1_G$ und somit $Z(G)^+ = \Gamma_G$. Es ist daher $H = K = L$ nebst $G' = F$, und $\mathcal{C}(G)$ hat höchstens die folgende Gestalt:



Das Beispiel 9 gehört in diese Gruppe.

Beispiel 6

$G = P_m$. Wir können vom Verband $\mathcal{L}(G)$ nach Fall (B) ausgehen. Es ist $Z(G) = Z(DDD \ 11m) = DDO \ 1$ und $Z(G)^\perp = OOD \ 1$, also ist $Z(G) \oplus Z(G)^\perp = DDD \ 1 = \Gamma_G = G^+$. Wir müssen noch $G' = \Gamma_{G'}$ ausrechnen. Wir untersuchen also Kommutatoren $a \cdot b \cdot a^{-1} \cdot b^{-1}$ in den drei Fällen:

- (i) a und b sind Translationen
- (ii) a ist eine Translation, b eine Spiegelung
- (iii) a und b sind beides Spiegelungen

Fall (i) a und b kommutieren, wir erhalten 1_G und somit keinen Beitrag an G' .

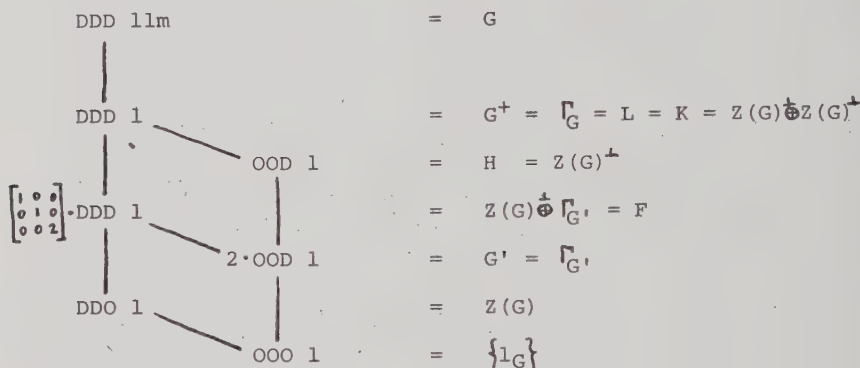
Fall (ii)

$$a \cdot b \cdot a^{-1} \cdot b^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & x & y & z \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & x & y & z \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Fall (iii)

$$a \cdot b \cdot a^{-1} \cdot b^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & x \\ 0 & 1 & 0 & y \\ 0 & 0 & -1 & z \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -x \\ 0 & 1 & 0 & -y \\ 0 & 0 & -1 & -z \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Die Kommutatoren spannen also nur die Untergruppe $2 \cdot \text{OOD } 1$ von $Z(G)^\perp = \text{OOD } 1$ auf. Unser Verband $\mathfrak{C}(G)$ hat somit die folgende Gestalt:



Beispiel 7

$$G = P \ 4mm = \text{DDD } 4mm, \quad \tilde{G} = 4mm, \quad \tilde{G}' = 4^2 = 2_Z = 2$$

$$Z(G) = \text{OOD } 1, \quad Z(G)^\perp = \text{DDO } 1, \quad Z(G) \dot{\oplus} Z(G)^\perp = \text{DDD } 1 = \Gamma_G$$

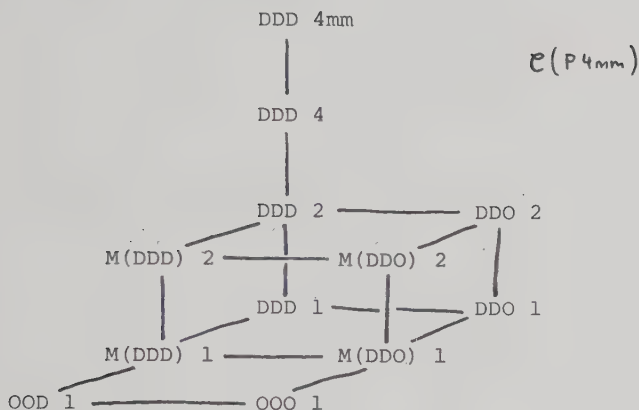
Wir müssen wieder Γ_G berechnen.

Die Digyren liefern mit den Translationen zusammen $2 \cdot \text{DDO}$ (siehe Beispiel 5 auf S.86). Was liefern etwa die vierzähligen Drehachsen und die Spiegelebenen?

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} m_x & h \\ 0 & l \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 4' & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} m_x & h \\ 0 & -l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2_z & 0 & -k \\ 0 & h & 0 \\ 0 & 0 & -l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2_z & h-k \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Es ist aber auch $\begin{pmatrix} 2_z & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \in G'$, Γ_G enthält also alle Translationen der Gestalt $(h+k, h-k, 0)$, es ist demnach $2 \cdot \text{DDO}(C) \subset \Gamma_G$. Auch Kommutatoren von Spiegelebenen und Translationen liefern diese Translationen, und es ist tatsächlich $\Gamma_G = 2 \cdot \text{DDO}(C) = M(\text{DDO})(P)$, wenn wir die Matrix M wählen als

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$



Der Verband $\mathcal{C}(P4mm)$ hat 12 Elemente, es fallen einzig die Gruppen K und L sowie Γ_G und $Z(G) \oplus Z(G)^\perp$ zusammen. Versuchen wir es also in Beispiel 8 mit einer zentrierten Raumgruppe, wo $\Gamma_G = DDD(I)$ und $Z(G) \oplus Z(G)^\perp = DDD(P)$ nicht zusammenfallen.

Beispiel 8

$G = I \ 4mm = DDD(I) \ 4mm$ (vgl. Beispiel 7)

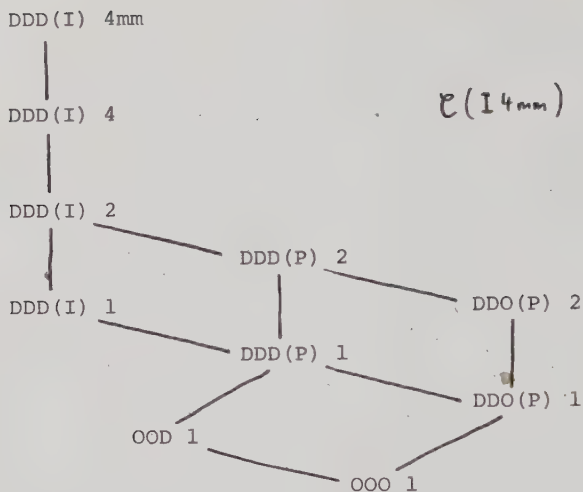
Die Kommutatorberechnung von Beispiel 7 bleibt gültig, nur sind jetzt in

$$\begin{pmatrix} h+k \\ 2z, & h-k \\ 0 \end{pmatrix}$$

auch h, k, l simultan halbzahlig zugelassen (I-Gitter). Damit erhalten wir aber $(1, 0, 0) \in \Gamma_G$, usw., und es ist

$\Gamma_G = Z(G)^\perp = DDO(P) \ 1 = DDO \ 1$. Es fallen die Gruppen

G' und H , F und K usw. zusammen, und $\mathcal{C}(G)$ hat noch weniger Elemente als in Beispiel 7 :



Beispiel 9

Dieses Beispiel soll insbesondere zeigen, dass die Kommutatorgruppe keineswegs symmorph sein muss.

$G = F 4_132$ (Nr. 210 in den Int. Tables), $\tilde{G}' = 23$

Es ist $\Gamma_{G'} = \Gamma_G = \text{DDD}(F)$ (Ohne Beweis. Man zeigt aber leicht, dass für $G = P32$ gilt $\Gamma_{G'} = \text{DDO}$ und daher $G' = \text{DDO } 3$.

Daraus folgt aber die Behauptung in unserem Beispiel !)

In unserem Beispiel ist also G' eine translationengleiche Untergruppe von G , und der Verband $\mathcal{C}(G)$ ist ziemlich klein:

DDD(F) 4_132	$= G = G^+$
DDD(F) 2_13	$= G' = H = K = L = F$
DDD(F) 1	$= \Gamma_G = \Gamma_{G'} = Z(G)^+$
OOO 1	$= Z(G) = \{1_G\}$

Man könnte das Spiel noch weiter treiben und auch die abgeleiteten Gruppen G'' , G''' usw. bis $G^{(n)} = \{1_G\}$ berechnen. Ist $G' = \Gamma_G$, so ist offenbar $G'' = \{1_G\}$, da die Translationen in Γ_G kommutieren. Gilt $\tilde{G}' \neq 1$, aber $\tilde{G}'' = 1$, so haben wir $G'' = \Gamma_{G'}$, $\subset \Gamma_G$, und wir können dem Verband $\mathcal{C}(G)$ mit $\Gamma_{G'}$ höchstens noch neue Translationsgruppen hinzufügen. Interessanter ist die Situation, wo auch $\tilde{G}'' \neq 1$ ist. Dies ist nur bei den kubischen Punktgruppen der Fall. Für $\tilde{G} = m\bar{3}m$ haben wir den Verband

$$\begin{array}{rcl}
 m\bar{3}m & = & \tilde{G} \\
 | & & \\
 432 & = & \tilde{G}^+ \\
 | & & \\
 23 & = & \tilde{G}' \\
 | & & \\
 222 & = & \tilde{G}'' \\
 | & & \\
 1 & = & \tilde{G}'''
 \end{array}$$

Wir müssten also $\mathcal{C}(G)$ um ein ganzes Stockwerk erweitern, und auch der "Boden" von $\mathcal{C}(G)$ würde durch die Translationsgruppen $\Gamma_{G'}$ und $\Gamma_{G''}$ vergrößert. Wir wollen aber darauf nicht weiter eingehen.

7.4 Einige weitere charakteristische Untergruppen von Raumgruppen

Nach dem bekannten Satz von Hermann (Korollar 8 in 7.3) ist jede Untergruppe H einer Raumgruppe G klassen-
gleiche Untergruppe einer translationengleichen Zwischen-
gruppe K . In der Situation

$$\begin{array}{ccccc} \Gamma_G & \xrightarrow{i} & G & \xrightarrow{\sim} & \tilde{G} \\ \uparrow i & & \uparrow i & & \uparrow i \\ \Gamma_H & \xrightarrow{i} & H & \xrightarrow{\sim} & \tilde{H} \end{array}$$

existiert also immer eine Zwischengruppe K , so dass gilt

$$\begin{array}{ccccc} \Gamma_G & \xrightarrow{i} & G & \xrightarrow{\sim} & \tilde{G} \\ \text{id} \downarrow & & \uparrow i & & \uparrow i \\ \Gamma_G = \Gamma_K & \xrightarrow{i} & K & \xrightarrow{\sim} & \tilde{K} = \tilde{H} \\ \uparrow i & & \uparrow i & & \uparrow \downarrow \text{id} \\ \Gamma_H & \xrightarrow{i} & H & \xrightarrow{\sim} & \tilde{H} \end{array}$$

Korollar 10 Ist H eine charakteristische Untergruppe der
Symmetriegruppe G , so ist auch die zugehörige
Zwischengruppe K charakteristisch.

Beweis K ist nach Korollar 8 und Satz 9 das Produkt
der (charakteristischen!) Untergruppen H und
 Γ_G .
Damit ist aber $K = H \cdot \Gamma_G$ nach Lemma 1 (ii)
selber charakteristisch.

Eine beliebige Untergruppe H einer Symmetriegruppe G
ist also genau dann charakteristisch, wenn für die Zwischen-
gruppe K gilt

$$\begin{array}{ll} H \trianglelefteq K, & \text{klassengleich!} \quad \text{und} \\ K \trianglelefteq G, & \text{translationengleich!} \end{array}$$

Damit kann das Problem, zu entscheiden, ob eine beliebige Untergruppe H in G charakteristisch ist oder nicht, immer auf den relativ einfachen klassengleichen und/oder translationengleichen Fall reduziert werden.

Umgekehrt ist es auch nicht ganz einfach, einer Raumgruppe beliebige (d.h. weder zellen- noch translationengleiche) charakteristische Untergruppen anzusehen. Deshalb bringt die Untergruppe G' mit ihrem Verband eine gute Einführung in den Problemkreis. In vielen Fällen ist es aber leicht, einer Raumgruppe translationengleiche oder klassengleiche charakteristische Untergruppen anzusehen. Einige solche Fälle wollen wir hier noch erwähnen, zumal sie noch einige Behauptungen bei Beispielen in den Abschnitten 4.3 und 4.4 abstützen.

Charakteristische translationengleiche Untergruppen von Raumgruppen

Im Abschnitt 4.3, Beispiel 4, war von der Raumgruppe $G = P \frac{2}{b} \frac{2_1}{c} \frac{2_1}{m}$ die Rede. Wir nutzten dort aus, dass die translationengleichen Untergruppen $P \frac{2}{b} 11$, $P 1 \frac{2_1}{c} 1$ und $P 11 \frac{2_1}{m}$ "offenbar" charakteristisch sind. Tatsächlich wird die Automorphismengruppe von $P bcm$ durch $D_2 D_2 D_2 \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ beschrieben, d.h. die Hauptrichtungen von G können nicht vertauscht werden. Da die erwähnten Untergruppen als translationengleiche Untergruppen aber alle Symmetrieelemente zur jeweiligen Hauptrichtung enthalten, müssen sie durch Automorphismen von G auf sich selbst abgebildet werden.

Man kann dies aber auch direkt einsehen, ohne die Automorphismengruppe von G zu kennen. Die drei erwähnten Untergruppen sind alle translationengleichen Untergruppen von G

zur Klasse $2/m$. Automorphismen von G können also diese drei Untergruppen höchstens untereinander permutieren. Dies ist aber ausgeschlossen, da sie von verschiedenem Typ sind: $P \frac{2}{b}$, $P \frac{2_1}{b}$ resp. $P \frac{2_1}{m}$ in der Standard-Aufstellung. Also bilden Automorphismen von G diese Untergruppen auf sich selbst ab, es handelt sich somit um charakteristische Untergruppen von G .

Satz 6 in 7.2. garantiert uns, dass wir zu jeder Untergruppe $\hat{H}$ von $\hat{G}$ auch eine translationengleiche Untergruppe B von G finden mit $\hat{B} = \hat{H}$. Wir haben deshalb nach denselben Überlegungen wie oben noch die folgenden charakteristischen *translationengleichen* Untergruppen von G :

- $P22_1 2_1 \not\subset G$ als einzige translationengleiche Untergruppe von G zur Klasse 222
- $P211 \not\subset G$, da die beiden anderen translationengleichen Untergruppen von G zur Klasse 2 vom Typ $P2_1$ und nicht $P2$ sind.
- $Pbc2_1$, $P2cm$ und $Pb2_1m$ sind die charakteristischen translationengleichen Untergruppen von G zur Klasse $2mm$, da die drei nicht äquivalent sind (Normalaufstellungen: $Pca2_1$, $Pma2$ und $Pmc2_1$).
- $P11m \not\subset G$, da die beiden andern translationengleichen Untergruppen von G zur Klasse m vom Typ Pb und nicht Pm sind.
- $P\bar{1} \not\subset G$ und $P1 = \Gamma_G \not\subset G$ als einzige translationengleiche Untergruppen zur Klasse $\bar{1}$ resp. 1.

Nicht direkt einsehen können wir nach dieser Methode, dass die beiden translationengleichen Untergruppen $Pb11$ und $P1c1$ charakteristisch sind in G . Dagegen sehen wir sofort, dass die beiden Ketten

$$Pb11 \not\subset G \quad Pb21m \not\subset G \quad ; \quad Plc1 \subset G \quad P2cm \not\subset G$$

richtig sind. Damit wissen wir aber nach Lemma 1 (iii) auch, dass $Pb11$ und $Plc1$ charakteristische Untergruppen von G sind.

Die Ueberlegungen, die hier am Beispiel von $Pbcm$ dargestellt wurden, begründen auch die übrigen Behauptungen über charakteristische Untergruppen in den Beispielen 6, 7 und 8 aus 4.4, oder, anders gesagt, man findet dort weitere Beispiele zur hier erwähnten Methode, charakteristische translationengleiche Untergruppen von Raumgruppen zu finden.

Charakteristische klassengleiche Untergruppen von Raumgruppen

Betrachten wir zuerst eine Raumgruppe G vom Typ $P2$. Wir wollen charakteristische klassengleiche Untergruppen H vom Typ $P2$ suchen. Eine solche erhalten wir, indem wir systematisch die Digyren in G "lichten". Ist die Untergruppe H etwa vom Index 2, so bilden auch alle gestrichenen Digyren, also diejenigen, die nicht in H liegen, zusammen mit Γ_G eine Untergruppe $\hat{H}$ von G vom Index 2 und vom Typ $P2$. Die beiden Untergruppen H und $\hat{H}$ können durch einen Automorphismus von G aufeinander abgebildet werden (z.B. Konjugation mit $\frac{1}{2} \cdot \vec{a}$)! Generell dürfen also nur spezielle Translationen weggelassen werden, wenn nicht irgendeine, sondern eine *charakteristische* klassengleiche Untergruppe übrigbleiben soll. Im folgenden behandeln wir unsystematisch einige Methoden, charakteristische klassengleiche Untergruppen abzuleiten.

a) Zentrierungstranslationen

Eine Raumgruppe G vom Typ B_m besitzt zwei klassen-
gleiche charakteristische Untergruppen vom Index 2,
nämlich P_m und P_a . B_m könnte man ja auch als B_a
aufstellen, und die beiden Untergruppen sind maximal
von ihrem Typ und nicht äquivalent. Benützen wir als
Erzeugendensystem von G eine bestimmte Spiegelebene m ,
die Translationen $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ sowie die Zentrierungs-
translation $\frac{1}{2}(\vec{a}+\vec{c})$, so erzeugen $\vec{a}, \vec{b}$ und $\vec{c}$ zu-
sammen mit m die Untergruppe P_m , zusammen mit
 $m \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot (\vec{a}+\vec{c})\right)$ die Untergruppe P_a .

Wenn wir von den üblichen Aufstellungen der Raumgruppen
ausgehen, wie sie in Tab. 6.2.1 der Int. Tables I (1969)
aufgelistet sind, so erhalten wir bei Uebergängen

$$DDD(\text{zentriert})\alpha\beta\gamma \longrightarrow DDD(P)\alpha\beta\gamma$$

immer charakteristische klassengleiche Untergruppen, da
die erzeugenden Elemente g resp. $g \cdot (\text{Zentrierungs-}$
translation) verschiedenen geometrischen Charakter und
daher auch verschiedene Symbole haben:

$$\begin{array}{llll} 2 \text{ resp. } 2_1 & ; & m \text{ resp. } a, b, c & \text{resp. } n, d & ; \\ 4_2 \text{ resp. } 4 & & \text{etc.} & \text{etc.} & \end{array}$$

Dieser Sachverhalt bedarf eigentlich keines Beweises,
denn umgekehrt ist diese Situation gerade der Anlass da-
zu, "nicht primitive" Elementarzellen zu wählen. (Exi-
stenz von verschiedenen Scharen geometrisch nicht gleich-
wertiger Symmetrieelemente, welche bei der Projektion " $\wedge$ "
auf die Punktgruppe $\hat{G}$ zusammenfallen.)

Weitere Beispiele:

- B2 hat zwei klassengleiche charakteristische Untergruppen P_2 und P_{2_1} vom Index 2
- F 432 hat zwei klassengleiche charakteristische Untergruppen P_{432} und P_{4_232} vom Index 4
- C222 hat zwei klassengleiche charakteristische Untergruppen P_{222} und $P_{2_12_12}$ vom Index 2
- R3 hat drei klassengleiche charakteristische Untergruppen P_3 , P_{3_1} und P_{3_2} vom Index 3
(beachte dazu die Warnung unter c)!).

Während der Uebergang zum P-Gitter immer charakteristische klassengleiche Untergruppen liefert, muss man bei anderen Uebergängen vorsichtig sein.

Der Uebergang $DDD(F)\alpha\beta\gamma \longrightarrow DDD(C)\alpha\beta\gamma$ wäre zum Beispiel vom Gitter her immer möglich, aber es ist gar nicht garantiert, dass dann auch eine Raumgruppe von diesem Typ existiert (Beispiele: kubische Raumgruppen, F dd2, F ddd). Auch wenn eine solche Untergruppe existiert, braucht sie noch lange nicht charakteristisch zu sein, es können ja äquivalente Untergruppen vom Gittertyp $DDD(A)$ oder $DDD(B)$ vorhanden sein (Beispiele: C222 in F222 oder Cmm in Fmmm). Einzig bei Fmm2 liefern auch solche Uebergänge charakteristische klassengleiche Untergruppen, nämlich Cmm2 und Cnn2 = Ccc2. Haben Sie übrigens gewusst, dass es nur 5 F-zentrierte orthorhombische Raumgruppentypen gibt?

Keine charakteristischen Untergruppen liefern Uebergänge der Art

$$DDD(P) \longrightarrow n \cdot DDD(\text{zentriert}), \text{ z.B. } DDD(P) \longrightarrow 2 \cdot DDD(I)$$

Wie beim Beispiel von P2 am Anfang dieses Abschnittes ist es hier reine Willkür, welche Scharen von Symmetrielementen nach dem "Lichten" übrigbleiben und welche weggefallen sind.

Soviel zu den Zentrierungstranslationen. Nun zu den

b) Translationen des Zentrums Z(G)

Alle nichtkubischen Raumgruppen, welche keine translativen Anteile in der $\vec{c}$ -Richtung aufweisen, lassen sich in ein semidirektes Produkt zerlegen, wie es die folgenden Beispiele zeigen (die Zerlegung ist diejenige aus § 6!):

$$\begin{aligned} \text{Beispiel} \quad Pm &= DDD(P)11m = DDO(P)11m \times OOD \ 1 \\ P3m1 &= DDD(P)3m1 = DDO(P)3m1 \times OOD \ 1 \\ Cmma &= DDD(C)mma = DDO(C)mma \times OOD \ 1 \end{aligned}$$

$$\text{Allgemein} \quad G = DDD \left(\begin{pmatrix} P \\ C \end{pmatrix} \right) \alpha \beta \gamma = DDO \left(\begin{pmatrix} P \\ C \end{pmatrix} \right) \alpha \beta \gamma \times OOD \ 1$$

Bei den Klassen 2, 3, 4, 6, 2mm, 3m, 4mm und 6mm handelt es sich dabei sogar um ein *direktes Produkt von charakteristischen Untergruppen*:

$$\begin{aligned} \text{Beispiel} \quad P3m1 &= DDD(P)3m1 = DDO(P)3m1 \times OOD \ 1 \\ Pba2 &= DDD(P)ba2 = DDO(P)ba2 \times OOD \ 1 \\ Cmm2 &= DDD(C)mm2 = DDO(C)mm2 \times OOD \ 1 \\ \text{Allgemein} \quad G &= DDD \left(\begin{pmatrix} P \\ C \end{pmatrix} \right) \alpha \beta \gamma = DDO \left(\begin{pmatrix} P \\ C \end{pmatrix} \right) \alpha \beta \gamma \times OOD \ 1 \\ &= G_0 \times Z(G) \end{aligned}$$

Die eindimensionale Translationsgruppe ist ja hier das Zentrum von G und daher sicher charakteristisch. Dass G_0 charakteristisch ist, kann man wie folgt einsehen: G_0 wird von der Menge $M = Z(G)^\perp \cup \{ \text{alle Symmetrieelemente von } G, \text{ welche keine Translationen sind} \}$ erzeugt (tatsächlich umfasst M schon alle Elemente von G_0). Jeder Automorphismus von G lässt aber $Z(G)^\perp$ stabil (Lemma 3 aus 7.1), und auch die Menge aller Nicht-Translationen wird natürlich auf sich selbst abgebildet (gemäss Forderung (ii) aus 1.2). M wird also durch Automorphismen von G auf sich selbst abgebildet, es gilt also $G_0 \triangleleft G$.

Wir haben somit für alle Raumgruppen G , deren Zentrum $Z(G)$ eindimensional ist und welche keine translativen Anteile in der Richtung von $Z(G)$ aufweisen, eine Zerlegung in ein direktes Produkt

$$G = G_0 \times Z(G)$$

wo G_0 eine charakteristische klassengleiche Untergruppe von G ist. Der Index von G_0 in G ist unendlich. Das Produkt der beiden charakteristischen Untergruppen ist sicher ein direktes, da ja die Elemente von G_0 und $Z(G)$ nach der Definition von $Z(G)$ miteinander kommutieren.

Mit $Z(G)$ ist auch jede charakteristische Untergruppe von $Z(G)$ selber charakteristisch in G . In $Z(G) = \text{OOD } 1$ ist aber jede Untergruppe charakteristisch:

Jede Untergruppe ist von der Gestalt $n \cdot \text{OOD } 1 = n \cdot Z \cdot \hat{c}$ für eine natürliche Zahl n , und zwei verschiedene Untergruppen sind nicht durch einen Automorphismus

von $Z(G)$ ineinander überzuführen, da sie von verschiedenem Index n sind oder weil der einzige nicht-triviale Automorphismus von $Z(G)$ durch $\vec{c} \mapsto -\vec{c}$ gegeben ist und diese Abbildung auch jede Untergruppe von $Z(G)$ auf sich selbst abbildet.

Damit können wir aber eine ganze Stange von charakteristischen klassengleichen Untergruppen solcher Raumgruppen angeben:

Ist $G = G_0 \times Z(G)$, so ist

$$H_n = G_0 \times n \cdot Z(G)$$

eine charakteristische klassengleiche Untergruppe von G vom Index n resp. ∞ (für $n=0$).

In dieser Notation ist

$$H_0 = G_0$$

$$H_1 = G$$

Finden wir weiter klassengleiche charakteristische Untergruppen G_{00} von G_0 , so sind auch alle Produkte $G_{00} \times n \cdot Z(G)$ charakteristische klassengleiche Untergruppen von G etc.

- c) Translationen aus $Z(G)$ weglassen, Gleitkomponente in dieser Richtung hinzufügen

Zu allen P- oder C-zentrierten Raumgruppen der Klassen 2, 3, 4, 6, 2mm, 3m, 4mm und 6mm können wir auch klassengleiche charakteristische Untergruppen finden, indem wir wieder wie in b) die Translationen des Zentrums lichten, nun aber gleichzeitig Gleitkomponenten in dieser Richtung hinzufügen resp. verlängern.

Beispiele

$$P_2 = \text{DDD } 112 \longrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \cdot n \end{bmatrix} \cdot \text{DDD}(P)112_1$$

$$P_{2_1} = \text{DDD } 112_1 \longrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2n+1 \end{bmatrix} \cdot \text{DDD}(P)112_1$$

$$P \ 4mm = \text{DDD } 4mm \longrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \cdot n \end{bmatrix} \cdot \text{DDD}(P)4_2mc$$

$$\text{und} \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \cdot n \end{bmatrix} \cdot \text{DDD}(P)4_2cm$$

Sind so entstandene *klassengleiche* Untergruppen wirklich charakteristisch?

Untersuchen wir wieder, ob wir zu einer solchen Untergruppe H ein Erzeugendensystem finden, welches invariant ist unter Automorphismen von G .

Es ist $\Gamma_H = Z(G)^\perp \oplus n \cdot Z(G)$. $n \cdot Z(G)$ ist als Untergruppe des Zentrums $Z(G)$ automatisch charakteristisch. Damit ist also Γ_H charakteristisch. Sei jetzt h eine Nichttranslation aus H . Wegen $Z(G)^\perp \subset \Gamma_G$ enthält H mit h auch die ganze Schar von h in G , somit auch alle möglichen Bilder $\mathfrak{Y}(h)$ für einen Automorphismus $\mathfrak{Y}$ von G . Also $\mathfrak{Y}(h) \in H$, und da h eine beliebige Nichttranslation war, folgt insgesamt $\mathfrak{Y}(H) = H$ für den beliebigen Automorphismus $\mathfrak{Y}$ von G .

Zum Schluss noch eine Warnung: Vorsicht ist überall dort nötig, wo die abgeleitete Untergruppe ein enantiomorphes Pendant besitzt! Solche sind nur dann garantiert charakteristisch, wenn den ganzen Betrachtungen die Automorphismengruppe $\text{Aut}^+(G)$ zugrundegelegt wird. In $\text{Aut}(G)$ kann es jedoch Automorphismen geben, welche enantiomorphe Untergruppen ineinander überführen (Beispiel: P_{3_1} und P_{3_2} vom Index 3 in P_3). Diese Situation haben wir schon angetroffen, als wir in a) die Untergruppen P_3 , P_{3_1} und P_{3_2} in R_3 betrachtet haben.

Die Definition von "charakteristischen Untergruppen" setzt eben eine Definition von "Automorphismus der Gruppe" voraus. Damit schliesst sich auch der Kreis der Zusammenhänge zwischen charakteristischen Untergruppen, Normalisatorgruppen und Automorphismengruppen.

§ 8

Tabellen zu den dreidimensionalen Symmetriegruppen mit Fixpunkt

8.1 $N_M(G)$ und $C_M(G)$

8.2 $N_E(G)$, $N_E^+(G)$, $C_E(G)$ und $C_E^+(G)$

8.3 $Z(G)$, $Z(G)^+$, G^+ und G^i

8.4 $\text{Aut}(G)$, $\text{Inl}(G)$ und $\text{Inl}^+(G)$

8.5 Komprimiert $\cup$ irreduzible Untermoduln

Tabelle 8.1

Normalisator- und Zentralisatorgruppen
von dreidimensionalen Symmetriegruppen
mit Fixpunkt in der Gruppe A

Die Gruppen $N_A(G)$ und $C_A(G)$ der triklinen, monoklinen und orthorhombischen Symmetriegruppen mit Fixpunkt beschreiben wir durch ihre Matrixdarstellung bezüglich einer (beliebigen) triklinen, monoklinen resp. orthorhombischen Basis.

Die Normalisatorgruppen $N_A(G)$ von wirteligen, kubischen und ikosaedrischen Symmetriegruppen mit Fixpunkt enthalten nur Transformationen $a \in \mathbb{R}$, welche sich als Produkt $c \cdot j$ darstellbar sind, wo j eine Isometrie ist und c über den unter G invarianten Teilräumen von KKK in Streckungen zerfällt.

Beispiel: Sei z.B. $G = OOO\ 6mm$. Dann ist $a \in N_A(G)$ das Produkt einer Isometrie j (aus $N_E(G) = OOK\ \frac{1222}{mmm}$) mit einer Streckung c_1 der Ebene KKO und einer Streckung c_2 der Geraden OOK (KKO und OOK sind die unter G invarianten Teilräume von KKK). Die Streckungsfaktoren $\det(c_1)$ und $\det(c_2)$ können dabei immer positiv gewählt werden. Es ist also $N_A(G)$ gruppentheoretisch ein direktes Produkt

$$N_A(G) \cong \mathbb{R}^+ \times OOK\ \frac{1222}{mmm} \times \mathbb{R}^+$$

wo in den beiden multiplikativen Gruppen $\mathbb{R}^+$ aller positiven reellen Zahlen die Streckungsfaktoren "verpackt" sind.

Wir werden für wirtelige, kubische und ikosaedrische Gruppen diese einfache Beschreibungsweise für $N_A(G)$ und $C_A(G)$ wählen.

000 1	trikline Basis	$N_H(G) \cong \left\{ \begin{bmatrix} a & b & c & k \\ d & e & f & l \\ g & h & i & m \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \in GL_4(\mathbb{R}) \right\}$ also $N_H(G) = \mathbb{H}_3 \cong \mathbb{R}^3 \rtimes GL_3(\mathbb{R})$	$C_H(G) = N_H(G)$
000 $\bar{1}$		$N_H(G) \cong \left\{ \begin{bmatrix} a & b & c & 0 \\ d & e & f & 0 \\ g & h & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \in GL_4(\mathbb{R}) \right\}$ also $N_H(G) \cong GL_3(\mathbb{R})$	$C_H(G) = N_H(G)$
000 112	monokline Basis	$N_H(G) \cong \left\{ \begin{bmatrix} a & b & 0 & 0 \\ d & e & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & m \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \in GL_4(\mathbb{R}) \right\}$ "volle affine Zylindergruppe"	$C_H(G) = N_H(G)$
000 11m		$N_H(G) \cong \left\{ \begin{bmatrix} a & b & 0 & k \\ d & e & 0 & l \\ 0 & 0 & i & m \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \in GL_4(\mathbb{R}) \right\}$ "volle affine Schichtgruppe"	$C_H(G) = N_H(G)$
000 11 $\frac{2}{m}$		$N_H(G) \cong \left\{ \begin{bmatrix} a & b & 0 & 0 \\ d & e & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & m \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \in GL_4(\mathbb{R}) \right\}$ "affine Zylinderpunktgruppe"	$C_H(G) = N_H(G)$
000 222	orthorhombische Basis	$N_H(G) \cong \left\{ \left[\begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \in GL_4(\mathbb{R}) \mid \begin{array}{l} A \text{ enthält in jeder Zeile} \\ \text{und jeder Spalte genau} \\ \text{einen Koeffizienten } \neq 0 \end{array} \right\}$	
		$C_H(G) \cong \left\{ \begin{bmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \in GL_4(\mathbb{R}) \right\}$	
000 mm2		$N_H(G) \cong \left\{ \left[\begin{bmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & m \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \in GL_4(\mathbb{R}) \mid \begin{array}{l} A = \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix} \text{ oder} \\ A = \begin{bmatrix} 0 & a \\ b & 0 \end{bmatrix} \end{array} \right\}$	
000 mmm		$C_H(G) \cong \left\{ \begin{bmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & m \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \in GL_4(\mathbb{R}) \right\}$	
		$N_H(G)$ und $C_H(G)$ wie bei 000 222	

G	$N_A(G)$	$C_A(G)$
($n \geq 3$)		
000 $n11$	$R^+ \times \text{OOK } \frac{\infty 22}{mmm} \times R^+$	$R^+ \times \text{OOK } \frac{\infty}{m} 11 \times R^+$
000 $\bar{n}11$	$R^+ \times \text{OOO } \frac{\infty 22}{mmm} \times R^+$	$R^+ \times \text{OOO } \frac{\infty}{m} 11 \times R^+$
000 $\frac{n}{m} 11$	$R^+ \times \text{OOO } \frac{\infty 22}{mmm} \times R^+$	$R^+ \times \text{OOO } \frac{\infty}{m} 11 \times R^+$
000 $n22$	$R^+ \times \text{OOO } \frac{2n 22}{mmm} \times R^+$	$R^+ \times \text{OOO } \frac{2}{m} 11 \times R^+$
000 $\frac{\bar{n} 2}{m} *$	$R^+ \times \text{OOO } \frac{2n 22}{mmm} \times R^+$	$R^+ \times \text{OOO } \frac{2}{m} 11 \times R^+$
000 $\bar{n} 2m "$	$R^+ \times \text{OOO } \frac{n 22}{mmm} \times R^+$	$R^+ \times \text{OOO } \frac{2}{m} 11 \times R^+$
000 nmm	$R^+ \times \text{OOK } \frac{2n 22}{mmm} \times R^+$	$R^+ \times \text{OOK } \frac{2}{m} 11 \times R^+$
000 $\frac{n 22}{mmm} "$	$R^+ \times \text{OOO } \frac{2n 22}{mmm} \times R^+$	$R^+ \times \text{OOO } \frac{2}{m} 11 \times R^+$
G kubisch	$R^+ \times \text{OOO } \frac{4 \bar{3} 2}{m \bar{3} m}$	$R^+ \times \text{OOO } \bar{1}$
G ikosaedr.	$R^+ \times \text{OOO } \frac{\bar{5} \bar{3} 2}{m \bar{5} 3 m}$	$R^+ \times \text{OOO } \bar{1}$

↑
 $N_E(G)$

↑
 $C_E(G)$

Bei den wirteligen Symmetriegruppen mit Fixpunkt bezieht sich ein Streckungsfaktor auf die Ebene KKO, der andere auf die Gerade OOK .

Die normalisierenden Transformationen von kubischen und ikosaedrigen Symmetriegruppen mit Fixpunkt haben einen globalen Streckungsfaktor für ganz KKK , unterscheiden sich also nur durch eine Transformation der Gestalt $\lambda \cdot 1$ (also um eine Streckung) von einer Isometrie.

*) n ungerade

") n gerade

	G	$N_E(G)$	$N_E^+(G)$	$C_E(G)$	$C_E^+(G)$
triklin	000 1	KKK $\frac{\infty\infty\infty}{mmm}$	KKK $\infty\infty\infty$	KKK $\frac{\infty\infty\infty}{mmm}$	KKK $\infty\infty\infty$
	000 $\bar{1}$	000 $\frac{\infty\infty\infty}{mmm}$	000 $\infty\infty\infty$	000 $\frac{\infty\infty\infty}{mmm}$	000 $\infty\infty\infty$
monoklin	000 112	OOK $\frac{22\infty}{mmm}$	OOK 22 ∞	OOK $\frac{22\infty}{mmm}$	OOK 22 ∞
	000 11m	KKO $\frac{22\infty}{mmm}$	KKO 22 ∞	KKO $\frac{22\infty}{mmm}$	KKO 22 ∞
	000 11 $\frac{2}{m}$	000 $\frac{22\infty}{mmm}$	000 22 ∞	000 $\frac{22\infty}{mmm}$	000 22 ∞
ortho- rhombisch	000 222	000 m3m	000 432	000 $\frac{222}{mmm}$	000 222
	000 mm2	OOK $\frac{422}{mmm}$	OOK 422	000 $\frac{222}{mmm}$	000 222
	000 $\frac{222}{mmm}$	000 m3m	000 432	000 $\frac{222}{mmm}$	000 222
wirtelig (n $\neq$ 3)	000 n11	OOK $\frac{\infty 22}{mmm}$	OOK $\infty 22$	OOK $\frac{\infty}{m} 11$	OOK $\infty 11$
	000 $\bar{n}11$	000 $\frac{\infty 22}{mmm}$	000 $\infty 22$	000 $\frac{\infty}{m} 11$	000 $\infty 11$
	000 $\frac{n}{m} 11$	000 $\frac{\infty 22}{mmm}$	000 $\infty 22$	000 $\frac{\infty}{m} 11$	000 $\infty 11$
	000 n22	000 $\frac{2n 22}{m mm}$	000 2n22	000 $\frac{2}{m} 11$	000 211
	000 nmm	OOK $\frac{2n 22}{m mm}$	OOK 2n22	OOK $\frac{2}{m} 11$	OOK 211
	000 $\frac{n}{m} 22$ *)	000 $\frac{2n 22}{m mm}$	000 2n22	000 $\frac{2}{m} 11$	000 211
	000 $\bar{n}2m$ ")	000 $\frac{n 22}{mmm}$	000 n22	000 $\frac{2}{m} 11$	000 211
	000 $\frac{n 22}{mmm}$ ")	000 $\frac{2n 22}{m mm}$	000 2n22	000 $\frac{2}{m} 11$	000 211
	000 23	000 m3m	000 432	000 $\bar{1}$	000 1
	000 $\frac{2}{m} \bar{3}$	000 m3m	000 432	000 $\bar{1}$	000 1
kubisch	000 432	000 m3m	000 432	000 $\bar{1}$	000 1
	000 $\bar{4}3m$	000 m3m	000 432	000 $\bar{1}$	000 1
	000 $\frac{4}{m} \frac{3}{m} \frac{2}{m}$	000 m3m	000 432	000 $\bar{1}$	000 1
	000 532	000 53m	000 532	000 $\bar{1}$	000 1
ikosa- edrisch	000 $\bar{5}3\frac{2}{m}$	000 53m	000 532	000 $\bar{1}$	000 1

*) n ungerade

") n gerade

Tabelle 8.3

Zentrum, Zentrum⁺, G⁺ und Kommutatorgruppe
G' von dreidimensionalen Punktgruppen G

G	G ⁺	G'	Z(G)	Z(G) ⁺
1	1	1	1	1
$\bar{1}$	1	1	$\bar{1}$	1
2	2	1	2	2
m	1	1	m	1
$2 \frac{1}{m}$	2	1	$2 \frac{1}{m}$	2
222	222	1	222	222
mm2	112	1	mm2	112
mmm	222	1	mmm	222
nll	nll	1	nll	nll
$\bar{n}11$ *)	$\frac{1}{2}n11$	1	$\bar{n}11$	nll
$\bar{n}11$ *)	nll	1	$\bar{n}11$	nll
$\frac{n}{m}11$	nll	1	$\frac{n}{m}11$	nll
n22 *)	n22	$\frac{1}{2}n11$	211	211

G	G ⁺	G'	Z(G)	Z(G) ⁺
n2 *)	n2	nll	1	1
nmn *)	nll	$\frac{1}{2}n11$	211	211
nm *)	nll	nll	1	1
$2 \frac{1}{m}$ *)	n2	nll	$\bar{1}$	1
$\bar{n}2m$ *)	$\frac{1}{2}n22$	$\frac{1}{2}n11$	211 *)	211 *)
$n22 \frac{1}{m}$ *)	n22	$\frac{1}{2}n11$	1 *)	1 *)
23	23	222	1	1
$2 \frac{1}{m}3$	23	222	$\bar{1}$	1
432	432	23	1	1
$\bar{4}3m$	23	23	1	1
$4 \frac{1}{m}32$	432	23	$\bar{1}$	1
532	532	532	1	1
$5 \frac{1}{m}32$	532	532	$\bar{1}$	1

*) n gerade > 3 *) n ungerade > 3

4) $\frac{1}{2}n$ geradeo) $\frac{1}{2}n$ ungerade

Tabelle 8.4

Die Automorphismengruppen von dreidimensionalen Punktgruppen resp. Symmetriegruppen mit Fixpunkt

G	Aut(G) 1)		Int(G)		Int ⁺ (G)	
	$\frac{N_F^+(G)}{C_F^+(G)}$	2)	$\frac{G}{Z(G)}$	2)	$\frac{G^+}{Z(G)^+}$	2)
1	$\frac{\infty \infty \infty}{\infty \infty \infty}$	1	$\frac{1}{1}$	1	$\frac{1}{1}$	1
$\bar{1}$	$\frac{\infty \infty \infty}{\infty \infty \infty}$	1	$\frac{1}{1}$	1	$\frac{1}{1}$	1
2	$\frac{22\infty}{22\infty}$	1	$\frac{2}{2}$	1	$\frac{2}{2}$	1
m	$\frac{22\infty}{22\infty}$	1	$\frac{m}{m}$	1	$\frac{1}{1}$	1
$\frac{2}{m}$	$\frac{22\infty}{22\infty}$	1	$\frac{\frac{2}{m}}{\frac{2}{m}}$	1	$\frac{2}{2}$	1
222	$\frac{432}{222}$	32	$\frac{222}{222}$	1	$\frac{222}{222}$	1
mm2	$\frac{422}{222}$	-	$\frac{mm2}{mm2}$	1	$\frac{2}{2}$	1
mmm	$\frac{432}{222}$	32	$\frac{mmm}{mmm}$	1	$\frac{222}{222}$	1
n11	$\frac{\infty 22}{\infty 11}$	121	$\frac{n11}{n11}$	1	$\frac{n11}{n11}$	1
$\bar{n}11$ *)	$\frac{\infty 22}{\infty 11}$	121	$\frac{\bar{n}11}{\bar{n}11}$	1	$\frac{n11}{n11}$ *)	1
$\bar{n}11$ ")	$\frac{\infty 22}{\infty 11}$	121	$\frac{\bar{n}11}{\bar{n}11}$	1	$\frac{\frac{1}{2}n11}{\frac{1}{2}n11}$ ")	1
$\frac{n}{m}11$	$\frac{\infty 22}{\infty 11}$	121	$\frac{\frac{n}{m}11}{\frac{n}{m}11}$	1	$\frac{n11}{n11}$	1
n2 *)	$\frac{2n22}{211}$	-	$\frac{n2}{1}$	n2	$\frac{n2}{1}$	n2
n22 ")	$\frac{2n22}{211}$	-	$\frac{n22}{211}$	-	$\frac{n22}{211}$	-
nm *)	$\frac{2n22}{211}$	-	$\frac{nm}{1}$	nm	$\frac{nm}{1}$	nm
mmm ")	$\frac{2n22}{211}$	-	$\frac{mmm}{211}$	-	$\frac{n11}{211}$	-
$\bar{n}\frac{2}{m}$ *)	$\frac{2n22}{211}$	-	$\frac{\bar{n}\frac{2}{m}}{2}$	n2	$\frac{n2}{1}$	n2
$\bar{n}2m$ ")	$\frac{n22}{211}$	-	$\frac{\bar{n}2m}{1}$ c)	$\bar{n}2m$	$\frac{\frac{1}{2}n22}{1}$ c)	-
$\frac{n22}{mmm}$ ")	$\frac{2n22}{211}$	-	$\frac{\bar{n}2m}{211}$ d)	-	$\frac{\frac{1}{2}n22}{211}$ d)	-
			$\frac{\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}}{\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}}$	-	$\frac{n22}{211}$	-

Erläuterung der Fussnoten auf der nächsten Seite

G	Aut(G) 1)		Int(G)		Int ⁺ (G)	
	$\frac{N_E^+(G)}{C_E^+(G)}$	2)	$\frac{G}{Z(G)}$	2)	$\frac{G^+}{Z(G)^+}$	2)
23	$\frac{432}{1}$	432	$\frac{23}{1}$	23	$\frac{23}{1}$	23
$\frac{2}{m}3$	$\frac{432}{1}$	432	$\frac{23}{1}$	23	$\frac{23}{1}$	23
432	$\frac{432}{1}$	432	$\frac{432}{1}$	432	$\frac{432}{1}$	432
$\bar{4}3m$	$\frac{432}{1}$	432	$\frac{43m}{1}$	$\bar{4}3m$	$\frac{23}{1}$	23
m3m	$\frac{432}{1}$	432	$\frac{m3m}{1}$	432	$\frac{432}{1}$	432
532	$\frac{532}{1}$	532	$\frac{532}{1}$	532	$\frac{532}{1}$	532
$\bar{5}3\frac{2}{m}$	$\frac{532}{1}$	532	$\frac{53m}{1}$	532	$\frac{532}{1}$	532

*) n ungerade $\triangleright 3$

") n gerade $\triangleright 3$

°) $\frac{1}{2}n$ ungerade

4) $\frac{1}{2}n$ gerade

1) Wegen Satz 1 von § 3 gilt $\text{Aut}(G) = \text{Iso Aut}(G)$ und $\text{Aut}(G) = \text{Aut}^+(G)$ sowie $\text{Iso Aut}(G) = \text{Iso Aut}^+(G)$

2) Die hier aufgeführte Transformationsgruppe ist isomorph zur entsprechenden Automorphismengruppe durch die Abbildung

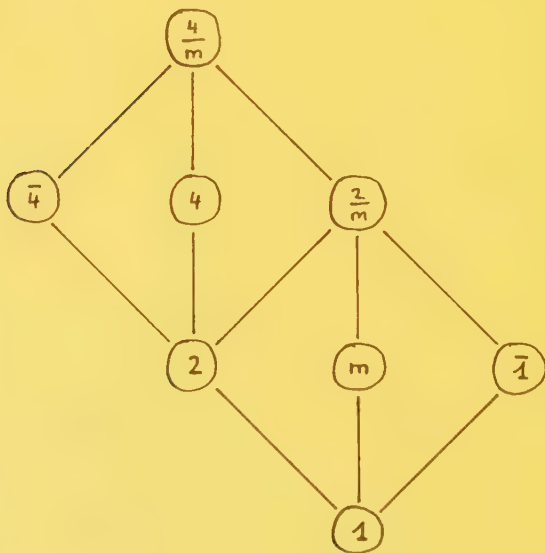
$g \mapsto \text{Konjugation mit } g$

Es ist eine Untergruppe von $N_E^+(G)$, G resp. G^+ . Sie existiert genau dann, wenn der Zähler der Faktorgruppe über dem Nenner in ein semidirektes Produkt zerfällt. Die Untergruppe ist i.A. nicht eindeutig bestimmt (z.B. 32 in 432 für $\frac{432}{222}$).

Beispiel 1

$$G = \frac{4}{m} \cong C_4 \times C_2$$

G ist kommutativ, jede Untergruppe von G ist also normal und es ist $V = V^*$. Es lässt aber auch jeder äussere Automorphismus alle Untergruppen invariant. Somit sind alle Untergruppen sogar charakteristisch, und es gilt $V = V^* = V^{**}$.

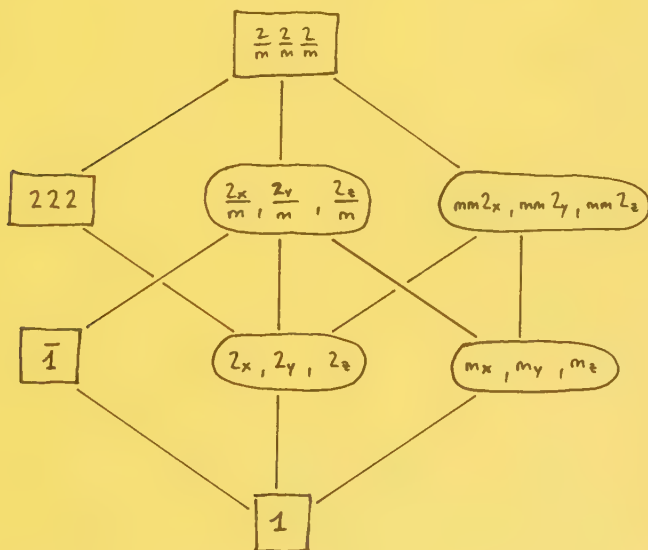


Beispiel 2

$$G = \frac{222}{mmm} \cong C_2 \times C_2 \times C_2$$

G ist ebenfalls kommutativ, es ist also wieder $V = V^*$. Dagegen können hier einige der (normalen) Untergruppen durch äussere Automorphismen ineinander übergeführt werden.

Wir zeichnen hier V^{**} , alle eingezeichneten Untergruppen sind normal, die eingekästelten sind sogar charakteristisch:



Beispiel 3

$$G = 422 \cong D_4$$

Siehe § 3 !

Nicht jede Untergruppe ist normal, und nicht jede normale Untergruppe ist charakteristisch.

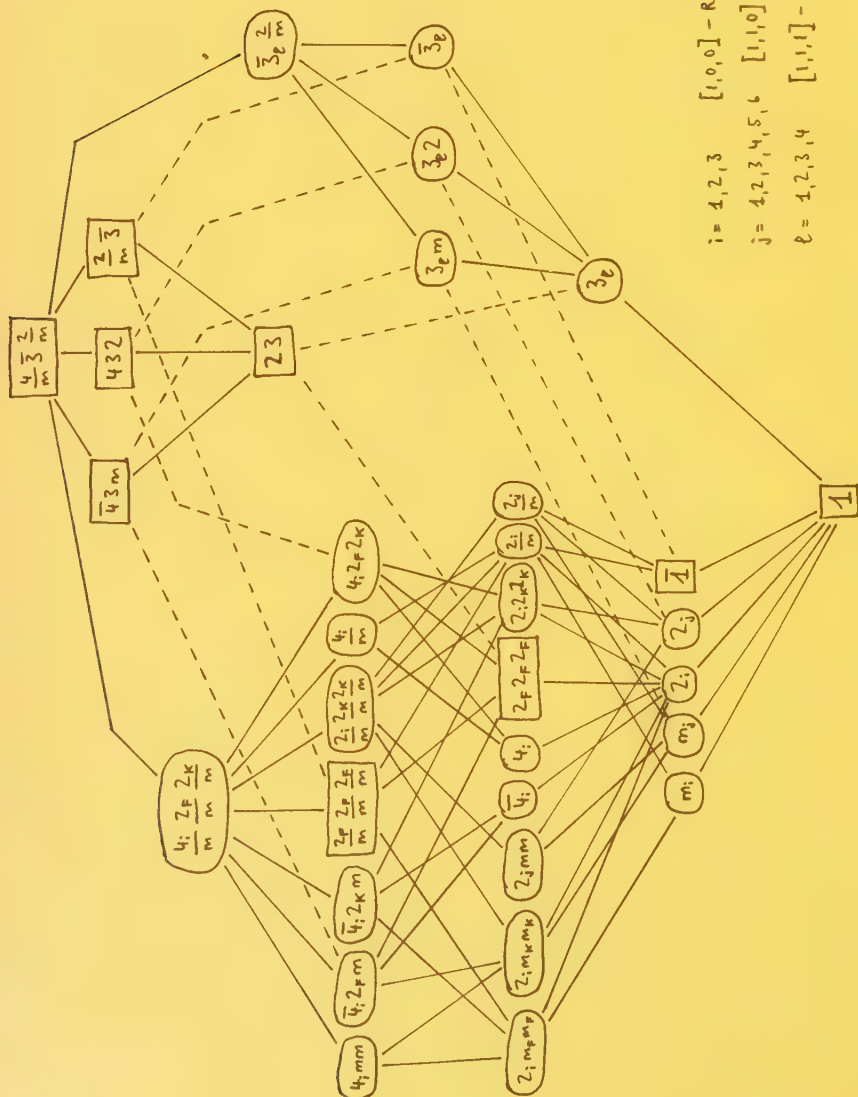
Es ist also $V \neq V^* \neq V^{**}$.

Beispiel 4

$$G = m_3 m$$

Es ist $V \neq V^* = V^{**}$.

Der Plan zeigt $V^* = V^{**}$


$$i = 1, 2, 3 \quad [1, 0, 0] - \text{Richtung} \quad \sim \quad F(\text{Fläche})$$
$$j = 4, 2, 3, 4, 5, 6 \quad [1, 1, 0] - \text{Richtung} \quad \sim K(\text{Kante})$$
$$e = 1, 2, 3, 4 \quad [1, 1, 1] - \text{Richtung}$$

§ 9

Tabellen zu den dreidimensionalen Raumgruppen

9.1

$\Gamma_N(G)$

9.2

$G, \tilde{G}, C(G), Z(G), N_E(G), N_{in}(G),$
 $Int(G), Iso\ Aut(G), Aut(G)$

Tabelle 9.1

Die Translationsgruppen $\Gamma_N(G)$ von drei-dimensionalen Raumgruppen

Arithm. Kristallklasse (gegeben durch ihren symmorphen Vertreter)	$\Gamma_N(G)$
P1 P $\bar{1}$	KKK $D_2D_2D_2$
P2, B2 Pm, Bm P^2/m , B^2/m	D_2D_2K KKD ₂ $D_2D_2D_2$
P222, C222, I222, Pmm, Cmmm, Fmmm, Immm F222 Pmm2, Amm2, Cmm2, Fmm2, Imm2	$D_2D_2D_2$ $D_2D_2D_2(I)$ D_2D_2K
P4, I4, P4mm, I4mm P $\bar{4}$, P^4/m , I^4/m , P422, I422, P $\bar{4}2m$, P $\bar{4}m2$, I $\bar{4}2m$, P^4/mmm , I^4/mmm I $\bar{4}$, I $\bar{4}m2$	M(DDK) M(DDD) M(DDD)(I)
P3, R3, P3m1, R3m1 P $\bar{3}$, P321, P $\bar{3}m1$, P $\bar{3}1m$, P^6/m , P622, P $\bar{6}2m$, P^6/mmm R $\bar{3}$, R321, R $\bar{3}m1$ P312, P $\bar{6}$, P $\bar{6}m2$ P31m, P6, P6mm	N(DDK) DDD ₂ L(DDD)(R) N(DDD) DDK
P23, I23, Pm3, Im3, P $\bar{4}3m$, I $\bar{4}3m$, P432, I432, Pm3m, Im3m F23, F $\bar{4}3m$ Fm3, F432, Fm3m	DDD(I) $D_2D_2D_2(I)$ $D_2D_2D_2$

$$M = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$N = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Tabelle 9.2

Normalisatorgruppen, Zentralisatorgruppen und
Automorphismengruppen von drei-dimensionalen
Raumgruppen

Im Prinzip enthält die Tabelle für jeden der 230 Typen von drei-dimensionalen Raumgruppen einen dreizeiligen Eintrag. Die Reihenfolge ist diejenige der Int.Tab. Vol.1 [23]. Das Arrangement der einzelnen Einträge ist das folgende:

Nr. in Int.Tab.	H-M-Symbol von G	Punktgruppe $\bar{G}$	Zentrum $Z(G)$	Zentralisator $C(G)$
	H-M-B-Symbol von G	Normalisatorgruppe $N_E(G)$		Normalisatorgr. $N_A(G)$
	Int(G)	Iso Aut(G)		Aut(G)

Damit enthält die Tabelle implizite auch die Gruppen G^+ , $N_E(G)^+$, $N_A(G)^+$, $\text{Int}^+(G)$, $\text{Iso Aut}^+(G)$ und $\text{Aut}^+(G)$, man braucht nur an der entsprechenden Stelle den Uebergang zur Untergruppe aller direkten Transformationen zu machen. Ableitung und Darstellung all dieser Resultate werden in den §§ 4,5 und 6 dieser Arbeit behandelt.

Bei den wirteligen und kubischen Raumgruppen gilt $N_A(G) = N_E(G)$ und daher $\text{Aut}(G) = \text{Iso Aut}(G)$. Die Zeilen zwei und drei enthalten dementsprechend nur je zwei Einträge. Ist das Zentrum von G trivial, also $Z(G) = 000 = C(G)$, so wären die Zeilen zwei und drei identisch. In diesen Fällen wird die dritte Zeile weggelassen.

Der eigentlichen Tabelle schicken wir noch eine Liste aller benötigten Basistransformationen und ihrer Matrizen voraus.

Zur Erinnerung: Die Äquivalenzklasse von $N_E(G)$ hängt nicht allein von der Äquivalenzklasse von G ab (vgl. p. 24/25). Die Tabelle 9.2 enthält jeweils die eindeutig bestimmte minimale Gruppe $N_E(G)$ zu jeder Äquivalenzklasse G .

Die benötigten Basistransformationen und ihre Matrizen

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$a \quad x \quad b \quad x \quad c$$

$$K = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

$$1/2 \, a \quad x \quad 1/2 \, b \quad x \quad 1/2 \, c$$

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

$$a \quad x \quad b \quad x \quad 1/2 \, c$$

$$M = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 \\ -1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

$$1/2 (a-b) \quad x \quad 1/2 (a+b) \quad x \quad 1/2 \, c$$

$$N = \begin{pmatrix} 1/3 & 1/3 & 0 \\ -1/3 & 2/3 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

$$1/3 (a-b) \quad x \quad 1/3 (a+2b) \quad x \quad 1/2 \, c$$

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

$$-b \quad x \quad a+b \quad x \quad 1/2 \, c$$

1	$P\bar{1}$	1	DDD	KKK
	$DDD(P)\bar{1}$		$KKK\bar{1}$	$KKK\text{ Kug}$
	$OOO\ 1$		$OOO\bar{1}$	$OOO\text{ Kug}$
2	$P\bar{1}$	$\bar{1}$	OOO	OOO
	$DDD(P)\bar{1}$		$K(DDD)\bar{1}$	$K(DDD)\text{ Kug}$
3	$P2$	2	OOD	OOK
	$DDD\ 112$		$D_2D_2K\ 11\frac{2}{m}$	$D_2D_2K\text{ Zyl}$
	$DDO\ 112$		$D_2D_2O\ 11\frac{2}{m}$	$D_2D_2O\text{ Zyl}$
4	$P2_1$	2	OOD	OOK
	$DDD\ 112_1$		$D_2D_2K\ 11\frac{2}{m}$	$D_2D_2K\text{ Zyl}$
	$DDO\ 112$		$D_2D_2O\ 11\frac{2}{m}$	$D_2D_2O\text{ Zyl}$
5	$B2$	2	OOD	OOK
	$DDD(B)\ 112$		$D_2D_2K\ 11\frac{2}{m}$	$D_2D_2K\text{ Zyl}(B)$
	$D_2DO(P)\ 112$		$D_2D_2O\ 11\frac{2}{m}$	$D_2D_2O\text{ Zyl}(B)$
6	Pm	m	DDO	KKO
	$DDD\ 11m$		$KKD_2\ 11\frac{2}{m}$	$KKD_2\text{ Zyl}$
	$OOD\ 11m$		$OOD_2\ 11\frac{2}{m}$	$OOD_2\text{ Zyl}$
7	Pb	m	DDO	KKO
	$DDD\ 11b$		$KKD_2\ 11\frac{2}{m}$	$KKD_2\text{ Zyl}(b)$
	$OOD\ 11m$		$OOD_2\ 11\frac{2}{m}$	$OOD_2\text{ Zyl}(b)$

8	Bm	m	DDO	KKO
	DDD(B) 11m		KKD ₂ 11 $\frac{2}{m}$	KKD ₂ Zyl(B)
	OOD ₂ 11m		OOD ₂ 11 $\frac{2}{m}$	OOD ₂ Zyl(B)
9	Bb	m	DDO	KKO
	DDD(B) 11b		KKD ₂ 11 $\frac{2}{m}$	KKD ₂ Zyl(Bb)
	OOD ₂ 11m		OOD ₂ 11 $\frac{2}{m}$	OOD ₂ Zyl(Bb)
10	F $\frac{2}{m}$	$\frac{2}{m}$	OOO	OOO
	DDD 11 $\frac{2}{m}$		D ₂ D ₂ D ₂ 11 $\frac{2}{m}$	D ₂ D ₂ D ₂ Zyl
11	F $\frac{2}{m}$ 1	$\frac{2}{m}$	OOO	OOO
	DDD 11 $\frac{2}{m}$ 1		D ₂ D ₂ D ₂ 11 $\frac{2}{m}$	D ₂ D ₂ D ₂ Zyl
12	B $\frac{2}{m}$	$\frac{2}{m}$	OOO	OOO
	DDD(B) 11 $\frac{2}{m}$		D ₂ D ₂ D ₂ 11 $\frac{2}{m}$	D ₂ D ₂ D ₂ Zyl(B)
13	F $\frac{2}{b}$	$\frac{2}{m}$	OOO	OOO
	DDD 11 $\frac{2}{b}$		D ₂ D ₂ D ₂ 11 $\frac{2}{m}$	D ₂ D ₂ D ₂ Zyl(b)
14	F $\frac{2}{b}$ 1	$\frac{2}{m}$	OOO	OOO
	DDD 11 $\frac{2}{b}$ 1		D ₂ D ₂ D ₂ 11 $\frac{2}{m}$	D ₂ D ₂ D ₂ Zyl(b)
15	B $\frac{2}{b}$	$\frac{2}{m}$	OOO	OOO
	DDD(B) 11 $\frac{2}{b}$		D ₂ D ₂ D ₂ 11 $\frac{2}{m}$	D ₂ D ₂ D ₂ Zyl(Bb)

16	$P222$ 222 $DDD(P)$ 222	000 $D_2D_2D_2(P)$ $\frac{222}{mmm}$	000 $D_2D_2D_2(P)$ $\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$
17	$P222_1$ 222 $DDD(P)$ 222_1	000 $D_2D_2D_2(P)$ $\frac{222}{mmm}$	000 $D_2D_2D_2(P)$ $\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}c$
18	$P2_12_12$ 222 $DDD(P)$ 2_12_12	000 $D_2D_2D_2(P)$ $\frac{222}{mmm}$	000 $D_2D_2D_2(P)$ $\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$
19	$P2_12_12_1$ 222 $DDD(P)$ $2_12_12_1$	000 $D_2D_2D_2(P)$ $\frac{222}{mmm}$	000 $D_2D_2D_2(P)$ $\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{n}$
20	$C222_1$ 222 $DDD(C)$ 222_1	000 $D_2D_2D_2(P)$ $\frac{222}{mmm}$	000 $D_2D_2D_2(P)$ $\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}c$
21	$C222$ 222 $DDD(C)$ 222	000 $D_2D_2D_2(P)$ $\frac{222}{mmm}$	000 $D_2D_2D_2(P)$ $\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$
22	$F222$ 222 $DDD(F)$ 222	000 $D_2D_2D_2(I)$ $\frac{222}{mmm}$	000 $D_2D_2D_2(I)$ $\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$
23	$I222$ 222 $DDD(I)$ 222	000 $D_2D_2D_2(P)$ $\frac{222}{mmm}$	000 $D_2D_2D_2(P)$ $\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$
24	$I2_12_12_1$ 222 $DDD(I)$ $2_12_12_1$	000 $D_2D_2D_2(P)$ $\frac{222}{mmm}$	000 $D_2D_2D_2(P)$ $\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{n}$
25	$Pmm2$ $mm2$ $DDD(P)$ $mm2$ $DDO(P)$ $mm2$	$00D$ $D_2D_2K(P)$ $\frac{222}{mmm}$ $D_2D_2O(P)$ $\frac{222}{mmm}$	$00K$ $D_2D_2K(P)$ $\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$ $D_2D_2O(P)$ $\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$
26	$Pmc2_1$ $mm2$ $DDD(P)$ $mc2_1$ $DDO(P)$ $mm2$	$00D$ $D_2D_2K(P)$ $\frac{222}{mmm}$ $D_2D_2O(P)$ $\frac{222}{mmm}$	$00K$ $D_2D_2K(P)$ $\frac{222}{mmm}$ $D_2D_2O(P)$ $\frac{222}{mmm}$

27	$Pcc2$ $mm2$	OOD	OOK
	$DDD(P) \quad cc2$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{422}{mmm}$
	$DDO(P) \quad mm2$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{422}{mmm}$
28	$Pma2$ $mm2$	OOD	OOK
	$DDD(P) \quad ma2$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$
	$DDO(P) \quad ma2$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$
29	$Pca2_1$ $mm2$	OOD	OOK
	$DDD(P) \quad ca2_1$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$
	$DDO(P) \quad ma2$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$
30	$Pnc2$ $mm2$	OOD	OOK
	$DDD(P) \quad nc2$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$
	$DDO(P) \quad bm2$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$
31	$Pmn2_1$ $mm2$	OOD	OOK
	$DDD(P) \quad mn2_1$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$
	$DDO(P) \quad ma2$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$
32	$Pba2$ $mm2$	OOD	OOK
	$DDD(P) \quad ba2$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{422}{mmm}$
	$DDO(P) \quad ba2$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{422}{mmm}$
33	$Pna2_1$ $mm2$	OOD	OOK
	$DDD(P) \quad na2_1$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$
	$DDO(P) \quad ba2$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$

34	$Pnn2$	$mm2$	OOD	OOK
	$DDD(P) \quad nn2$		$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{422}{mmm}$
	$DDO(P) \quad ba2$		$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{422}{mmm}$
35	$Cmm2$	$mm2$	OOD	OOK
	$DDD(C) \quad mm2$		$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{422}{mmm}$
	$DDO(C) \quad mm2$		$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{422}{mmm}$
36	$Cmc2_1$	$mm2$	OOD	OOK
	$DDD(C) \quad mc2_1$		$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$
	$DDO(C) \quad mm2$		$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$
37	$Ccc2$	$mm2$	OOD	OOK
	$DDD(C) \quad cc2$		$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{422}{mmm}$
	$DDO(C) \quad mm2$		$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{422}{mmm}$
38	$Amm2$	$mm2$	OOD	OOK
	$DDD(A) \quad mm2$		$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$
	$DD_2O(P) \quad mm2$		$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$
39	$Abm2$	$mm2$	OOD	OOK
	$DDD(A) \quad bm2$		$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$
	$DD_2O(P) \quad mm2$		$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$
40	$Ama2$	$mm2$	OOD	OOK
	$DDD(A) \quad ma2$		$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \quad \frac{222}{mmm}$
	$DD_2O(P) \quad ma2$		$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \quad \frac{222}{mmm}$

41	$Aba2$	$mm2$	OOD	OOK
	$DDD(A) \ ba2$		$D_2D_2K(P) \ \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \ \frac{222}{mmm}$
	$DD_2O(P) \ ma2$		$D_2D_2O(P) \ \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \ \frac{222}{mmm}$
42	$Fmm2$	$mm2$	OOD	OOK
	$DDD(F) \ mm2$		$D_2D_2K(P) \ \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \ \frac{422}{mmm}$
	$D_2D_2O(P) \ mm2$		$D_2D_2O(P) \ \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \ \frac{422}{mmm}$
43	$Fdd2$	$mm2$	OOD	OOK
	$DDD(F) \ d\bar{d}2$		$D_2D_2K(P) \ \frac{222}{ba\bar{n}}$	$D_2D_2K(P) \ \frac{422}{nb\bar{m}}$
	$D_2D_2O(P) \ ba2$		$D_2D_2O(P) \ \frac{222}{ba\bar{n}}$	$D_2D_2O(P) \ \frac{422}{nb\bar{m}}$
44	$Imm2$	$mm2$	OOD	OOK
	$DDD(I) \ mm2$		$D_2D_2K(P) \ \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \ \frac{422}{mmm}$
	$DDO(C) \ mm2$		$D_2D_2O(P) \ \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \ \frac{422}{mmm}$
45	$Iba2$	$mm2$	OOD	OOK
	$DDD(I) \ ba2$		$D_2D_2K(P) \ \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \ \frac{422}{mmm}$
	$DDO(C) \ ba2$		$D_2D_2O(P) \ \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \ \frac{422}{mmm}$
46	$Ima2$	$mm2$	OOD	OOK
	$DDD(I) \ ma2$		$D_2D_2K(P) \ \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2K(P) \ \frac{222}{mmm}$
	$DDO(C) \ ma2$		$D_2D_2O(P) \ \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2O(P) \ \frac{222}{mmm}$
47	$Pmmm$	mmm	OOO	OOO
	$DDD(P) \ \frac{222}{mmm}$		$D_2D_2D_2(P) \ \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2D_2(P) \ 'm3m'$
48	$Pnnn$	mmm	OOO	OOO
	$DDD(P) \ \frac{222}{nn\bar{n}}$		$D_2D_2D_2(P) \ \frac{222}{mmm}$	$D_2D_2D_2(P) \ 'm3m'$

49	$Pccm$	mmm	000	000
	$DDD(P) ccm$		$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) \cdot \frac{422}{mmm}$
50	$Pban$	mmm	000	000
	$DDD(P) ban$		$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) \cdot \frac{422}{mmm}$
51	$Pmma$	mmm	000	000
	$DDD(P) mma$		$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$
52	$Pnna$	mmm	000	000
	$DDD(P) nna$		$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$
53	$Pmna$	mmm	000	000
	$DDD(P) mna$		$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$
54	$Pcca$	mmm	000	000
	$DDD(P) cca$		$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$
55	$Pbam$	mmm	000	000
	$DDD(P) bam$		$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) \cdot \frac{422}{mmm}$
56	$Pccn$	mmm	000	000
	$DDD(P) ccn$		$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) \cdot \frac{422}{mmm}$
57	$Pbcm$	mmm	000	000
	$DDD(P) bcm$		$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$

58	$Pnnm$	mmm	000	000
	$DDD(P) \ nnm$		$K(DDD)(P) \ \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) \ , \frac{422}{mmm} ,$
59	$Pmmn$	mmm	000	000
	$DDD(P) \ mmn$		$K(DDD)(P) \ \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) \ , \frac{422}{mmm} ,$
60	$Pbcn$	mmm	000	000
	$DDD(P) \ bcn$		$K(DDD)(P) \ \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) \ \frac{222}{mmm}$
61	$Pbca$	mmm	000	000
	$DDD(P) \ bca$		$K(DDD)(P) \ \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) \ , \frac{2}{3} ,$
62	$Pnma$	mmm	000	000
	$DDD(P) \ nma$		$K(DDD)(P) \ \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) \ \frac{222}{mmm}$
63	$Cmcm$	mmm	000	000
	$DDD(C) \ mcm$		$K(DDD)(P) \ \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) \ \frac{222}{mmm}$
64	$Cmca$	mmm	000	000
	$DDD(C) \ mca$		$K(DDD)(P) \ \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) \ \frac{222}{mmm}$
65	$Cmmm$	mmm	000	000
	$DDD(C) \ mmm$		$K(DDD)(P) \ \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) \ , \frac{422}{mmm} ,$
66	$Cccm$	mmm	000	000
	$DDD(C) \ ccm$		$K(DDD)(P) \ \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) \ , \frac{422}{mmm} ,$

67	<i>Cmma</i>	<i>mmm</i>	<i>000</i>	<i>000</i>
	<i>DDD(C) mma</i>		$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) ' \frac{422}{mm} ,$
68	<i>Ccca</i>	<i>mmm</i>	<i>000</i>	<i>000</i>
	<i>DDD(C) cca</i>		$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) ' \frac{422}{mm} ,$
69	<i>Fmmm</i>	<i>mmm</i>	<i>000</i>	<i>000</i>
	<i>DDD(F) mmm</i>		$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) ' m3m '$
70	<i>Fddd</i>	<i>mmm</i>	<i>000</i>	<i>000</i>
	<i>DDD(F) ddd</i>		$K(DDD)(P) \frac{222}{nnn}$	$K(DDD)(P) ' \frac{42\bar{2}}{n} \frac{2}{m} ,$
71	<i>Immm</i>	<i>mmm</i>	<i>000</i>	<i>000</i>
	<i>DDD(I) mmm</i>		$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) ' m3m '$
72	<i>Ibam</i>	<i>mmm</i>	<i>000</i>	<i>000</i>
	<i>DDD(I) bam</i>		$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) ' \frac{422}{mm} ,$
73	<i>Ibca</i>	<i>mmm</i>	<i>000</i>	<i>000</i>
	<i>DDD(I) bca</i>		$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) ' \frac{42\bar{2}}{n} \frac{2}{m} ,$
74	<i>Imma</i>	<i>mmm</i>	<i>000</i>	<i>000</i>
	<i>DDD(I) mma</i>		$K(DDD)(P) \frac{222}{mmm}$	$K(DDD)(P) ' \frac{422}{m} \frac{2}{mc} '$

75 $P4$ 4 OOD OOK

$DDD(P)4$ $\frac{D-D}{2} \quad \frac{D+D}{2} \quad K(P) \quad \frac{422}{mmm}$

$DDO(P)4$ $\frac{D-D}{2} \quad \frac{D+D}{2} \quad O(P) \quad \frac{422}{mmm}$

76 $P4_1$ 4 OOD OOK

$DDD(P)4_1$ $\frac{D-D}{2} \quad \frac{D+D}{2} \quad K(P) \quad 422$

$DDO(P)4$ $\frac{D-D}{2} \quad \frac{D+D}{2} \quad O(P) \quad 422$

77 $P4_2$ 4 OOD OOK

$DDD(P)4_2$ $\frac{D-D}{2} \quad \frac{D+D}{2} \quad K(P) \quad \frac{422}{mmm}$

$DDO(P)4$ $\frac{D-D}{2} \quad \frac{D+D}{2} \quad O(P) \quad \frac{422}{mmm}$

78	$P4_3$	4	OOD	OOK
	$DDD(P)4_3$		$\frac{D-D}{2} \frac{D+D}{2} K(P)$	422
	$DDO(P)4$		$\frac{D-D}{2} \frac{D+D}{2} O(P)$	422
79	$I4$	4	OOD	OOK
	$DDD(I)4$		$\frac{D-D}{2} \frac{D+D}{2} K(P)$	$\frac{422}{mmm}$
	$DDO(C)4$		$\frac{D-D}{2} \frac{D+D}{2} O(P)$	$\frac{422}{mmm}$
80	$I4_1$	4	OOD	OOK
	$DDD(I)4_1$		$\frac{D-D}{2} \frac{D+D}{2} K(P)$	$\frac{422}{nbm}$
	$DDO(C)4$		$\frac{D-D}{2} \frac{D+D}{2} O(P)$	$\frac{422}{nbm}$
81	$P\bar{4}$	$\bar{4}$	OOO	OOO
	$DDD(P)\bar{4}$		$M(DDD)(P)$	$\frac{422}{mmm} = \frac{D-D}{2} \frac{D+D}{2} D_2(P) \frac{422}{mn}$
82	$I\bar{4}$	$\bar{4}$	OOO	OOO
	$DDD(I)\bar{4}$		$M(DDD)(I)$	$\frac{422}{mmm}$
83	$P\frac{4}{m}$	$\frac{4}{m}$	OOO	OOO
	$DDD(P)\frac{4}{m}$		$M(DDD)(P)$	$\frac{422}{mmm}$
84	$P\frac{4}{m}2$	$\frac{4}{m}$	OOO	OOO
	$DDD(P)\frac{4}{m}2$		$M(DDD)(P)$	$\frac{422}{mmm}$
85	$P\frac{4}{n}$	$\frac{4}{n}$	OOO	OOO
	$DDD(P)\frac{4}{n}$		$M(DDD)(P)$	$\frac{422}{mmm}$

86	$P\frac{4}{n}2$	$\frac{4}{m}$	000	000
	$DDD(P)\frac{4}{n}2$		$M(DDD)(P)\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	
87	$I\frac{4}{m}$	$\frac{4}{m}$	000	000
	$DDD(I)\frac{4}{m}$		$M(DDD)(P)\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	
88	$I\frac{4}{a}1$	$\frac{4}{m}$	000	000
	$DDD(I)\frac{4}{a}1$		$M(DDD)(P)\frac{4}{n}\frac{2}{n}\frac{2}{nm}$	
89	$P422$	422	000	000
	$DDD(P)422$		$M(DDD)(P)\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	
90	$P4_12$	422	000	000
	$DDD(P)4_12$		$M(DDD)(P)\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	
91	$P4_122$	422	000	000
	$DDD(P)4_122$		$M(DDD)(P)4_222$	
92	$P4_12_12$	422	000	000
	$DDD(P)4_12_12$		$M(DDD)(P)4_222$	
93	$P4_222$	422	000	000
	$DDD(P)4_222$		$M(DDD)(P)\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	
94	$P4_22_12$	422	000	000
	$DDD(P)4_22_12$		$M(DDD)(P)\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	
95	$P4_322$	422	000	000
	$DDD(P)4_322$		$M(DDD)(P)4_222$	

96	$P4_3 2_1 2$	422	000	000
	$DDD(P) 4_3 2_1 2$		$M(DDD)(P) 4_2 22$	
97	$I422$	422	000	000
	$DDD(I) 422$		$M(DDD)(P) \frac{422}{mmm}$	
98	$I4_1 22$	422	000	000
	$DDD(I) 4_1 22$		$M(DDD)(P) \frac{4_2 22}{n \quad nm}$	
99	$P4mm$	4mm	00D	00K
	$DDD(P) 4mm$		$M(DDK)(P) \frac{422}{mmm}$	
	$DDO(P) 4mm$		$\frac{D-D}{2} \quad \frac{D+D}{2} \quad O(P) \quad \frac{422}{mmm}$	
100	$P4bm$	4mm	00D	00K
	$DDD(P) 4bm$		$M(DDK)(P) \frac{422}{mmm}$	
	$DDO(P) 4bm$		$\frac{D-D}{2} \quad \frac{D+D}{2} \quad O(P) \quad \frac{422}{mmm}$	
101	$P4_2 cm$	4mm	00D	00K
	$DDD(P) 4_2 cm$		$M(DDK)(P) \frac{422}{mmm}$	
	$DDO(P) 4mm$		$\frac{D-D}{2} \quad \frac{D+D}{2} \quad O(P) \quad \frac{422}{mmm}$	
102	$P4_2 nm$	4mm	00D	00K
	$DDD(P) 4_2 nm$		$M(DDK)(P) \frac{422}{mmm}$	
	$DDO(P) 4bm$		$\frac{D-D}{2} \quad \frac{D+D}{2} \quad O(P) \quad \frac{422}{mmm}$	
103	$P4cc$	4mm	00D	00K
	$DDD(P) 4cc$		$M(DDK)(P) \frac{422}{mmm}$	
	$DDO(P) 4mm$		$\frac{D-D}{2} \quad \frac{D+D}{2} \quad O(P) \quad \frac{422}{mmm}$	

04 $P4nc$ 4mm OOD OOK

$$DDD(P)4nc \quad M(DDK)(P) \frac{422}{mmm}$$

$$DDO(P)4bm \quad \frac{D-D}{2} \frac{D+D}{2} O(P) \frac{422}{mmm}$$

05 $P4_2mc$ 4mm OOD OOK

$$DDD(P)4_2mc \quad M(DDK)(P) \frac{422}{mmm}$$

$$DDO(P)4mm \quad \frac{D-D}{2} \frac{D+D}{2} O(P) \frac{422}{mmm}$$

06 $P4_2bc$ 4mm OOD OOK

$$DDD(P)4_2bc \quad M(DDK)(P) \frac{422}{mmm}$$

$$DDO(P)4bm \quad \frac{D-D}{2} \frac{D+D}{2} O(P) \frac{422}{mmm}$$

07 $I4mm$ 4mm OOD OOK

$$DDD(I)4mm \quad M(DDK)(P) \frac{422}{mmm}$$

$$DDO(C)4mm \quad \frac{D-D}{2} \frac{D+D}{2} O(P) \frac{422}{mmm}$$

08 $I4cm$ 4mm OOD OOK

$$DDD(I)4cm \quad M(DDK)(P) \frac{422}{mmm}$$

$$DDO(C)4mm \quad \frac{D-D}{2} \frac{D+D}{2} O(P) \frac{422}{mmm}$$

09 $I4_1md$ 4mm OOD OOK

$$DDD(I)4_1md \quad M(DDK)(P) \frac{422}{nbm}$$

$$DDO(C)4md = \frac{D-D}{2} \frac{D+D}{2} O(P)4bm \quad \frac{D-D}{2} \frac{D+D}{2} O(P) \frac{422}{nbm}$$

10 $I4_1cd$ 4mm OOD OOK

$$DDD(I)4_1cd \quad M(DDK)(P) \frac{422}{nbm}$$

$$DDO(C)4md = \frac{D-D}{2} \frac{D+D}{2} O(P)4bm \quad \frac{D-D}{2} \frac{D+D}{2} O(P) \frac{422}{nbm}$$

111	$P\bar{4}2m$	$\bar{4}2m$	000	000
	$DDD(P)\bar{4}2m$		$M(DDD)(P)$	$\frac{422}{mmm}$
112	$P\bar{4}2c$	$\bar{4}2m$	000	000
	$DDD(P)\bar{4}2c$		$M(DDD)(P)$	$\frac{422}{mmm}$
113	$P\bar{4}2_1m$	$\bar{4}2m$	000	000
	$DDD(P)\bar{4}2_1m$		$M(DDD)(P)$	$\frac{422}{mmm}$
114	$P\bar{4}2_1c$	$\bar{4}2m$	000	000
	$DDD(P)\bar{4}2_1c$		$M(DDD)(P)$	$\frac{422}{mmm}$
115	$P\bar{4}m2$	$\bar{4}2m$	000	000
	$DDD(P)\bar{4}m2$		$M(DDD)(P)$	$\frac{422}{mmm}$
116	$P\bar{4}c2$	$\bar{4}2m$	000	000
	$DDD(P)\bar{4}c2$		$M(DDD)(P)$	$\frac{422}{mmm}$
117	$P\bar{4}b2$	$\bar{4}2m$	000	000
	$DDD(P)\bar{4}b2$		$M(DDD)(P)$	$\frac{422}{mmm}$
118	$P\bar{4}n2$	$\bar{4}2m$	000	000
	$DDD(P)\bar{4}n2$		$M(DDD)(P)$	$\frac{422}{mmm}$
119	$I\bar{4}m2$	$\bar{4}2m$	000	000
	$DDD(I)\bar{4}m2$		$M(DDD)(I)$	$\frac{422}{mmm}$

20	$I\bar{4}c2$ $DDD(I)\bar{4}c2$	$\bar{4}2m$	000 $M(DDD)(I) \frac{422}{mmm}$	000
21	$I\bar{4}2m$ $DDD(I)\bar{4}2m$	$\bar{4}2m$	000 $M(DDD)(P) \frac{422}{mmm}$	000
22	$I\bar{4}2d$ $DDD(I)\bar{4}2d$	$\bar{4}2m$	000 $M(DDD)(P) \frac{422}{n \ n\bar{m}}$	000
23 - 140	$((G))$ $DDD((G))$	$\frac{422}{mmm}$	000 $M(DDD)(P) \frac{422}{mmm}$	000
41	$I\frac{4122}{a \ m\bar{d}}$ $DDD(I)\frac{4122}{a \ m\bar{d}}$	$\frac{422}{mmm}$	000 $M(DDD)(P) \frac{422}{n \ n\bar{m}}$	000
42	$I\frac{4122}{a \ c\bar{d}}$ $DDD(I)\frac{4122}{a \ c\bar{d}}$	$\frac{422}{mmm}$	000 $M(DDD)(P) \frac{422}{n \ n\bar{m}}$	000
43	$P3$ $DDD(P)3$ $DDO(P)3$	3	000 $N(DDK)(P) \frac{622}{mmm}$ $N(DDO)(P) \frac{622}{mmm}$	000
44	$P3_1$ $DDD(P)3_1$ $DDO(P)3$	3	000 $N(DDK)(P) \ 622$ $N(DDO)(P) \ 622$	000

145	$P\bar{3}_2$	3	OOD	OOK
	$DDD(P)3_2$		$N(DDK)(P) 622$	
	$DDO(P)3$		$N(DDO)(P) 622$	
146	$R3$	3	OOD	OOK
	$DDD(R)3$		$N(DDK)(P) \bar{3}1m$	
	$N(DDG)(P)3$		$N(DDO)(P) \bar{3}1m$	
147	$P\bar{3}$	$\bar{3}$	OOO	OOO
	$DDD(P)\bar{3}$		$DDD_2(P) \frac{622}{mmm}$	
148	$R\bar{3}$	$\bar{3}$	OOO	OOO
	$DDD(R)\bar{3}$		$L(DDD)(R) \bar{3}m$	
149	$P312$	322	OOO	OOO
	$DDD(P)312$		$N(DDD)(P) \frac{622}{mmm}$	
150	$P321$	322	OOO	OOO
	$DDD(P)321$		$DDD_2(P) \frac{622}{mmm}$	
151	$P3_112$	322	OOO	OOO
	$DDD(P)3_112$		$N(DDD)(P) 6_222$	
152	$P3_121$	322	OOO	OOO
	$DDD(P)3_121$		$DDD_2(P) 6_222$	
153	$P3_212$	322	OOO	OOO
	$DDD(P)3_212$		$N(DDD)(P) 6_422$	

154	$P3_221$	322	000	000
	$DDD(P)3_221$		$DDD_2(P)6_422$	
155	$R32$	322	000	000
	$DDD(R)32$		$L(DDD)(R)\bar{3}m$	
156	$P3m1$	3m	00D	00K
	$DDD(P)3m1$		$N(DDK)(P)\frac{622}{mmm}$	
	$DDO(P)3m1$		$N(DDO)(P)\frac{622}{mmm}$	
157	$P31m$	3m	00D	00K
	$DDD(P)31m$		$DDK(P)\frac{622}{mmm}$	
	$DDO(P)31m$		$DDO(P)\frac{622}{mmm}$	
158	$P3c1$	3m	00D	00K
	$DDD(P)3c1$		$N(DDK)(P)\frac{622}{mmm}$	
	$DDO(P)3m1$		$N(DDO)(P)\frac{622}{mmm}$	
159	$P31c$	3m	00D	00K
	$DDD(P)31c$		$DDK(P)\frac{622}{mmm}$	
	$DDO(P)31m$		$DDO(P)\frac{622}{mmm}$	
160	$R3m$	3m	00D	00K
	$DDD(R)3m$		$N(DDK)(P)\bar{3}1m$	
	$N(DDO)(P)31m$		$N(DDO)(P)\bar{3}1m$	
161	$R3c$	3m	00D	00K
	$DDD(R)3c$		$N(DDK)(P)\bar{3}1m$	
	$N(DDO)(P)31m$		$N(DDO)(P)\bar{3}1m$	

162	$P\bar{3}1\frac{2}{m}$ $DDD(P)\bar{3}1\frac{2}{m}$	$\bar{3}1\frac{2}{m}$	000 $DDD_2(P)\frac{622}{mmm}$	000
163	$P\bar{3}1\frac{2}{c}$ $DDD(P)\bar{3}1\frac{2}{c}$	$\bar{3}1\frac{2}{m}$	000 $DDD_2(P)\frac{622}{mmm}$	000
164	$P\bar{3}\frac{2}{m}1$ $DDD(P)\bar{3}\frac{2}{m}1$	$\bar{3}\frac{2}{m}$	000 $DDD_2(P)\frac{622}{mmm}$	000
165	$P\bar{3}\frac{2}{c}1$ $DDD(P)\bar{3}\frac{2}{c}1$	$\bar{3}\frac{2}{m}$	000 $DDD_2(P)\frac{622}{mmm}$	000
166	$R\bar{3}\frac{2}{m}$ $DDD(R)\bar{3}\frac{2}{m}$	$\bar{3}\frac{2}{m}$	000 $L(DDD)(R)\bar{3}\frac{2}{m}$	000
167	$R\bar{3}\frac{2}{c}$ $DDD(R)\bar{3}\frac{2}{c}$	$\bar{3}\frac{2}{m}$	000 $L(DDD)(R)\bar{3}\frac{2}{m}$	000
168	$P6$ $DDD(P)6$ $DDO(P)6$	6	000 $DDK(P)\frac{622}{mmm}$ $DDO(P)\frac{622}{mmm}$	000
169	$P6_1$ $DDD(P)6_1$ $DDO(P)6$	6	000 $DDK(P)622$ $DDO(P)622$	000

170	$P6_5$	6	OOD	OOK
	$DDD(P)6_5$		$DDK(P) \ 622$	
	$DDO(P)6$		$DDO(P) \ 622$	
171	$P6_2$	6	OOD	OOK
	$DDD(P)6_2$		$DDK(P) \ 622$	
	$DDO(P)6$		$DDO(P) \ 622$	
172	$P6_4$	6	OOD	OOK
	$DDD(P)6_4$		$DDK(P) \ 622$	
	$DDO(P)6$		$DDO(P) \ 622$	
173	$P6_3$	6	OOD	OOK
	$DDD(P)6_3$		$DDK(P) \ \frac{622}{mmm}$	
	$DDO(P)6$		$DDO(P) \ \frac{622}{mmm}$	
174	$P\bar{6}$	$\bar{6}$	OOO	OOO
	$DDD(P)\bar{6}$		$N(DDD)(P) \ \frac{622}{mmm}$	
175	$P\frac{6}{m}$	$\frac{6}{m}$	OOO	OOO
	$DDD(P)\frac{6}{m}$		$DDD_2(P) \ \frac{622}{mmm}$	
176	$P\frac{63}{m}$	$\frac{6}{m}$	OOO	OOO
	$DDD(P)\frac{63}{m}$		$DDD_2(P) \ \frac{622}{mmm}$	
177	$P622$	622	OOO	OOO
	$DDD(P)622$		$DDD_2(P) \ \frac{622}{mmm}$	

178	$P6_122$	622	000	000
	$DDD(P)6_122$		$DDD_2(P)6_222$	
179	$P6_522$	622	000	000
	$DDD(P)6_522$		$DDD_2(P)6_422$	
180	$P6_222$	622	000	000
	$DDD(P)6_222$		$DDD_2(P)6_422$	
181	$P6_422$	622	000	000
	$DDD(P)6_422$		$DDD_2(P)6_222$	
182	$P6_322$	622	000	000
	$DDD(P)6_322$		$DDD_2(P)\frac{622}{mmm}$	
183	$P6mm$	6mm	000	000
	$DDD(P)6mm$		$DDK(P)\frac{622}{mmm}$	
	$DDO(P)6mm$		$DDO(P)\frac{622}{mmm}$	
184	$P6cc$	6mm	000	000
	$DDD(P)6cc$		$DDK(P)\frac{622}{mmm}$	
	$DDO(P)6mm$		$DDO(P)\frac{622}{mmm}$	
185	$P6_3cm$	6mm	000	000
	$DDD(P)6_3cm$		$DDK(P)\frac{622}{mmm}$	
	$DDO(P)6mm$		$DDO(P)\frac{622}{mmm}$	

186	$P6_3mc$	$6mm$	OOD	OOK
	$DDD(P)6_3mc$		$DDK(P) \frac{622}{mmm}$	
	$DDO(P)6mm$		$DDO(P) \frac{622}{mmm}$	
187	$P\bar{6}m2$	$\bar{6}m2$	OOO	OOO
	$DDD(P)\bar{6}m2$		$N(DDD)(P) \frac{622}{mmm}$	
188	$P\bar{6}c2$	$\bar{6}m2$	OOO	OOO
	$DDD(P)\bar{6}c2$		$N(DDD)(P) \frac{622}{mmm}$	
189	$P\bar{6}2m$	$\bar{6}m2$	OOO	OOO
	$DDD(P)\bar{6}2m$		$DDD_2(P) \frac{622}{mmm}$	
190	$P\bar{6}2c$	$\bar{6}m2$	OOO	OOO
	$DDD(P)\bar{6}2c$		$DDD_2(P) \frac{622}{mmm}$	
191	$P\frac{622}{mmm}$	$\frac{622}{mmm}$	OOO	OOO
	$DDD(P)\frac{622}{mmm}$		$DDD_2(P) \frac{622}{mmm}$	
192	$P\frac{622}{mcc}$	$\frac{622}{mmm}$	OOO	OOO
	$DDD(P)\frac{622}{mcc}$		$DDD_2(P) \frac{622}{mmm}$	
193	$P\frac{6322}{mcm}$	$\frac{622}{mmm}$	OOO	OOO
	$DDD(P)\frac{6322}{mcm}$		$DDD_2(P) \frac{622}{mmm}$	
194	$P\frac{6322}{m\bar{m}c}$	$\frac{622}{mmm}$	OOO	OOO
	$DDD(P)\frac{6322}{m\bar{m}c}$		$DDD_2(P) \frac{622}{mmm}$	

195	$P23$ $DDD(P)23$	23	000 $DDD(I) \frac{4}{m} \frac{1}{3} \frac{2}{m}$	000
196	$F23$ $DDD(F)23$	23	000 $D_2D_2D_2(I) m3m$	000
197	$I23$ $DDD(I)23$	23	000 $DDD(I) m3m$	000
198	$P2_13$ $DDD(P)2_13$	23	000 $DDD(I) \frac{4}{a} 1 \frac{1}{3} \frac{2}{d} = Ia3d$	000
199	$I2_13$ $DDD(I)2_13$	23	000 $DDD(I) \frac{4}{a} 1 \frac{1}{3} \frac{2}{d} = Ia3d$	000
200	$P \frac{2}{m} \bar{3}$ $DDD(P) \frac{2}{m} \bar{3}$	$\frac{2}{m} \bar{3}$	000 $DDD(I) m3m$	000
201	$P \frac{2}{n} \bar{3}$ $DDD(P) \frac{2}{n} \bar{3}$	$\frac{2}{m} \bar{3}$	000 $DDD(I) m3m$	000
202	$F \frac{2}{m} \bar{3}$ $DDD(F) \frac{2}{m} \bar{3}$	$\frac{2}{m} \bar{3}$	000 $D_2D_2D_2(P) m3m$	000
203	$F \frac{2}{d} \bar{3}$ $DDD(F) \frac{2}{d} \bar{3}$	$\frac{2}{m} \bar{3}$	000 $D_2D_2D_2(P) \frac{4}{n} 2 \frac{1}{3} \frac{2}{m}$	000
204	$I \frac{2}{m} \bar{3}$ $DDD(I) \frac{2}{m} \bar{3}$	$\frac{2}{m} \bar{3}$	000 $DDD(I) m3m$	000
205	$P \frac{2}{a} 1 \bar{3}$ $DDD(P) \frac{2}{a} 1 \bar{3}$	$\frac{2}{m} \bar{3}$	000 $DDD(I) \frac{2}{a} 1 \bar{3}$	000
206	$I \frac{2}{a} 1 \bar{3}$ $DDD(I) \frac{2}{a} 1 \bar{3}$	$\frac{2}{m} \bar{3}$	000 $DDD(I) \frac{4}{a} 1 \frac{1}{3} \frac{2}{d}$	000

207	$P432$ $DDD(P)432$	432	000 $DDD(I) m3m$	000
208	$P4_232$ $DDD(P)4_232$	432	000 $DDD(I) m3m$	000
209	$F432$ $DDD(F)432$	432	000 $D_2D_2D_2(P) m3m$	000
210	$F4_132$ $DDD(F)4_132$	432	000 $D_2D_2D_2(P) \frac{4}{n}2\bar{3}\frac{2}{m}$	000
211	$I432$ $DDD(I)432$	432	000 $DDD(I) m3m$	000
212	$P4_332$ $DDD(P)4_332$	432	000 $DDD(I) 4_132 = DDD(I) 4_332$	000
213	$P4_132$ $DDD(P)4_132$	432	000 $DDD(I) 4_132$	000
214	$I4_132$ $DDD(I)4_132$	432	000 $DDD(I) \frac{4}{a}1\bar{3}\frac{2}{a}$	000
215	$P\bar{4}3m$ $DDD(P)\bar{4}3m$	$\bar{4}3m$	000 $DDD(I) m3m$	000
216	$F\bar{4}3m$ $DDD(F)\bar{4}3m$	$\bar{4}3m$	000 $D_2D_2D_2(I) m3m$	000
217	$I\bar{4}3m$ $DDD(I)\bar{4}3m$	$\bar{4}3m$	000 $DDD(I) m3m$	000
218	$P\bar{4}3n$ $DDD(P)\bar{4}3n$	$\bar{4}3m$	000 $DDD(I) m3m$	000

219	$F\bar{4}3c$	$\bar{4}3m$	000	000
	$DDD(F)\bar{4}3c$		$D_2D_2D_2(I) m3m$	
220	$I\bar{4}3d$	$\bar{4}3m$	000	000
	$DDD(I)\bar{4}3d$		$DDD(I)\frac{4}{a}1\bar{3}\frac{2}{d}$	
221	$P\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$	$m3m$	000	000
	$DDD(P)m3m$		$DDD(I) m3m$	
222	$P\frac{4}{n}\bar{3}\frac{2}{n}$	$m3m$	000	000
	$DDD(P)n3n$		$DDD(I) m3m$	
223	$P\frac{4}{m}2\bar{3}\frac{2}{n}$	$m3m$	000	000
	$DDD(P)m3n$		$DDD(I) m3m$	
224	$P\frac{4}{n}2\bar{3}\frac{2}{m}$	$m3m$	000	000
	$DDD(P)n3m$		$DDD(I) m3m$	
225	$F\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$	$m3m$	000	000
	$DDD(F)m3m$		$D_2D_2D_2(P) m3m$	
226	$F\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{c}$	$m3m$	000	000
	$DDD(F)m3c$		$D_2D_2D_2(P) m3m$	
227	$F\frac{4}{d}1\bar{3}\frac{2}{m}$	$m3m$	000	000
	$DDD(F)d3m$		$D_2D_2D_2(P)\frac{4}{n}2\bar{3}\frac{2}{m}$	
228	$F\frac{4}{d}1\bar{3}\frac{2}{c}$	$m3m$	000	000
	$DDD(F) d3c$		$D_2D_2D_2(P)\frac{4}{n}2\bar{3}\frac{2}{m}$	
229	$I\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$	$m3m$	000	000
	$DDD(I)m3m$		$DDD(I) m3m (!)$	
230	$I\frac{4}{a}1\bar{3}\frac{2}{d}$	$m3m$	000	000
	$DDD(I)a3d$		$DDD(I)\frac{4}{a}1\bar{3}\frac{2}{d} (!)$	

§ 10 Historisches und Bibliographisches

10.1 Historische Bemerkungen und Literaturhinweise

Die historische Entwicklung der Ableitung der Punkt- und Raumgruppen wird ausführlich in [14] dargestellt. Weniger ausführlich, aber ebenso interessant ist der historische Teil im Buch von Schwarzenberger [39]. Nimmt man noch die Publikation [31] von Koptsik hinzu, so hat man auch noch eine Darstellung aus russischer Sicht und insgesamt ein recht vollständiges Literaturverzeichnis bis 1978.

Wir möchten hier nur speziell die wichtigen Stationen aufführen, die die Theorie der Untergruppen, der Normalisatorgruppen und der Automorphismengruppen von Symmetriegruppen kennzeichnen.

Der erste, der die Untergruppen von Raumgruppen näher untersuchte, war C. Hermann. Seine Arbeiten sind noch heute sehr lesenswert. Erst in den 60er Jahren erschienen wieder Publikationen, die über [27] von Hermann hinausführten. Zu erwähnen sind hier vor allem Neubüser und Wondratschek, deren Ansätze [34] schliesslich zu einer vollständigen Liste der nicht-isosymbolischen maximalen Untergruppen von Raumgruppen führten [45]. Die isosymbolischen Untergruppen untersuchte dann Billiet in [8] und einigen späteren Arbeiten. Sayari, Billiet und Zarrouk lieferten 1977 und 1978 auch vollständige Sätze von Matrizen, welche alle möglichen Gruppen-Untergruppen-Übergänge von triklinen und monoklinen Raumgruppen sowie von allen zweidimensionalen Raumgruppen beschreiben [37, 38].

In die Untersuchung der Äquivalenzklassen von Untergruppen mündeten schliesslich auch die Arbeiten über Farbgruppen, wie

sie sinnvoll erst 1961 von Van der Waerden und Burckhardt in [43] definiert wurden. In der schönen Arbeit [40] von Senechal finden sich dazu weitere Literaturangaben. Ueber charakteristische Untergruppen und insbesondere über die Kommutatorgruppen von Raumgruppen ist uns keine Publikation bekannt.

Normalisatorgruppen von Symmetriegruppen tauchen erstmals 1968 unter dem Namen "Cheshire"- Gruppen auf bei Hirshfeld [29]. Galiulin beschreibt 1976 die Normalisatorgruppen der Punktgruppen in $O_3(\mathbb{R})$ und verwendet dabei auch diesen gruppentheoretischen Begriff. Diese Normalisatorgruppen und auch die entsprechenden Zentralisatorgruppen waren 1975 auch Billiet bekannt, als er die Automorphismengruppen der Punktgruppen ableitete (private Mitteilung). Die Normalisatorgruppen der arithmetischen Kristallklassen in $GL_n(\mathbb{Z})$ für $n = 3$ und $n = 4$ spielen in [14] eine grosse Rolle und sind dort auch durch Erzeugendensysteme angegeben.

Auch die Arbeiten [8,9,10,37] von Billiet, Sayari und Zarrouk enthalten sehr viele Informationen über die Normalisatorgruppen von Raumgruppen in A . Man braucht nur die Resultate zu den isosymbolischen Untergruppen-Uebergängen mit Determinante ± 1 zu sammeln. Die Autoren haben aber diesen Zusammenhang nirgends klargestellt. Die erste Arbeit, welche die Zusammenhänge von Normalisatorgruppen, Cheshire-Gruppen und Automorphismengruppen von Raumgruppen korrekt beschreibt, stammt von Burzlaff und Zimmermann [16]. Sie erschien Ende 1980, als die hier vorliegende Arbeit materiell bereits komplett war. Als Vorläufer der Arbeit von Burzlaff und Zimmermann muss noch die Publikation [30] von Koch und Fischer erwähnt werden, die eine Liste der Automorphismengruppen von orthorhombischen, wirteligen und kubischen Raumgruppen enthält, aber die Cheshire-Gruppen von Hirshfeld noch nicht einzuordnen weiss.

10.2 Literaturverzeichnis

- [1] Alexander, E. und Herrmann, K.
"Zur Theorie der flüssigen Kristalle"
Z.Krist. 69 , 285 - 299 , 1929
- [2] Alexander, E. und Herrmann, K.
"Systematik der eindimensionalen Raumgruppen"
Z.Krist. 70 , 367 - 382 , 1929
Korrektur in Z.Krist. 89 , S. 606 , 1934
- [3] Ascher, E. und Janner, A.
"Algebraic Aspects of Crystallography: Space Groups
as Extensions"
Helv.Phys.Acta 38 , 551 - 572 , 1965
- [4] Bertaut, E.F.
"On Maximal Subgroups with increased Unit Cell"
Acta Cryst. A 32 , 976 - 983 , 1976
- [5] Bertaut, E.F.
"Study of Principal Subgroups and of their General
Positions in C and I Groups of Class $mmm - D_{2h}$ "
Acta Cryst. A 32 , 380 - 387 , 1976
- [6] Bertaut, E.F. and Billiet, Y.
"On equivalent Subgroups and Supergroups of the
Space Groups"
Acta Cryst. A 35 , 733 - 745 , 1979
- [7] Bieberbach, L.
"Ueber die Bewegungsgruppen der Euklidischen Räume. II "
Math.Ann. 72 , 400 - 412 , 1912
- [8] Billiet, Y.
"Les sous-groupes isosymboliques des groupes spatiaux"
Bull.Soc.Franç. Minér.Cryst. 96 , 327 - 334 , 1973

- [9] Billiet, Y., Sayari, A. et Zarrouk, H.
 "La détermination systématique des Sous-Groupes
 Spatiaux et des Changements de Repère Conventionnelle
 der Groupes Spatiaux"
 Acta Cryst. A 34 , 414 - 421 , 1978

- [10] Billiet, Y., Sayari, A. et Zarrouk, H.
 "L'Association des Familles de Wyckoff dans les
 Changements de Repère Conventionnel des Groupes
 Spatiaux et les Passages aux Sous-Groupes Spatiaux"
 Acta Cryst. A 34 , 811 - 819 , 1978

- [11] Billiet, Y.
 "Le Groupe P_1 et ses Sous-Groupes. I . Outillage
 Mathématique: Automorphisme et Factorisation Matricielle"
 Acta Cryst. A 35 , 485 - 496 , 1979

- [12] Billiet, Y. et Rolley le Coz, M.
 "Le Groupe P_1 et ses Sous-Groupes. II . Tables des
 Sous-Groupes"
 Acta Cryst. A 36 , 242 - 248 , 1980

- [13] Billiet, Y.
 Tabellen der Iso Aut(G) für die dreidimensionalen
 Punktgruppen
 Private Mitteilung 1979 . Die Tabellen wurden 1974 erstellt.

- [14] Brown, H., Bülow, R., Neubüser, J., Wondratschek, H. und
 Zassenhaus, H.
 "Crystallographic Groups of Four-Dimensional Space"
 John Wiley and Sons, New York, 1978

- [15] Buchmann, H.
 "Die abgeschlossenen Untergruppen der Isometriegruppe
 des dreidimensionalen reellen affinen Raumes
 oder
 Die Symmetrien des Raumes"
 Diplomarbeit, Universität Zürich, WS 78/79

- [16] Burzlaff, H. und Zimmermann, H.
 "On the choice of origins in the description of
 space groups"
 Z.Krist. 153 , 151 - 179 , 1980
- [17] Coxeter, H.S.M.
 "Introduction to Geometry"
 John Wiley and Sons, New York, 1961
- [18] Frobenius, F.G.
 "Ueber die unzerlegbaren diskreten Bewegungsgruppen"
 Sitzungsber.Preuss.Akad.Wiss.Berlin Phys.Math.Kl.,
 241 - 248 , 1911 (Gesammelte Abhandlungen III , 507 - 518 ,
 Springer, Berlin, 1968)
- [19] Gabriel, P.
 "Klassische Gruppen und Geometrie II "
 Vorlesung an der Universität Zürich, SS 1978
- [20] Galiulin, R.V.
 "Holoedral varieties of simple forms of crystals"
 Sov.Phys.Cryst. 23/6 , 635 - 641 , 1978
- [21] Harker, D.
 "A table of the Colored Crystallographic and Icosa-
 hedral Point Groups, including their Chirality and
 Diamorphism"
 Acta Cryst. A 32 , 133 - 139 , 1976
- [22] Heesch, H.
 "Zur systematischen Strukturtheorie IV : Ueber die
 Symmetrien zweiter Art in Kontinuen und Semikontinuen"
 Z.Krist. 81 , 230 - 242 , 1932
- [23] Henry, N.F.M. and Lonsdale, K. (Herausgeber)
 "International Tables for X-Ray Crystallography, Vol I "
 Kynoch Press, Birmingham, 1952 . (3rd edition 1976)

- [24] Hermann, C.
 "Systematische Strukturtheorie I : Eine neue Raum-
 gruppensymbolik"
 Z.Krist. 68 , 257 - 287 , 1928
- [25] Hermann, C.
 "Systematische Strukturtheorie II : Ableitung der
 230 Raumgruppen aus ihren Kennvektoren"
 Z.Krist. 69 , 226 - 249 , 1928
- [26] Hermann, C.
 "Systematische Strukturtheorie III : Ketten- und
 Netzgruppen"
 Z.Krist. 69 , 250 - 270 , 1928
- [27] Hermann, C.
 "Systematische Strukturtheorie IV : Untergruppen"
 Z.Krist. 69 , 533 - 555 , 1929
- [28] Hermann, C.
 "Bemerkungen zu der vorstehenden Arbeit von Ch. Mauguin"
 Z.Krist. 76 , 559 - 560 , 1931
- [29] Hirshfeld, F.L.
 "Symmetry in the Generation of Trial Structures"
 Acta Cryst. A 24 , 301 - 309 , 1968
- [30] Koch, E. und Fischer, W.
 "Automorphismengruppen von Raumgruppen und die Zuordnung
 von Punktlagen zu Konfigurationslagen"
 Acta Cryst. A 31 , 88 - 95 , 1975
- [31] Koptsik, V.A.
 "A general sketch of the Developement of the Theory
 of Symmetry and its Application in Physical Crystallo-
 graphy over the last 50 years"
 Sov.Phys.Cryst. 12 , 667 - 683 , 1968
- [32] Kuratowsky, K.
 "Introduction to set theory and topology"
 Polish Scientific Publishers, Warszawa, 1962
 (Pergamon Press)

- [33] Mauguin, Ch.
 "Sur le symbolisme des groupes de répétition ou de symétrie des assemblages cristallins"
 Z.Krist. 76 , 542 - 558 , 1931
- [34] Neubüser, J. und Wondratschek, H.
 "Untergruppen der Raumgruppen"
 Kristall und Technik, 1 , 529 - 543 , 1966
- [35] Niggli, P.
 "Probleme der Naturwissenschaften. Erläutert am Begriff der Mineralart."
 Birkhäuser, Basel, 1949
- [36] Pontrjagin, L.
 "Topological Groups"
 Princeton University Press, 1946
- [37] Sayari, A. und Billiet, Y.
 "Subgroups and changes of standard settings of triclinic and monoclinic space groups"
 Acta Cryst. A 33 , 985 - 986 , 1977
- [38] Sayari, A., Billiet, Y. und Zarrouk, H.
 "Complete list of subgroups and changes of standard settings of two-dimensional space groups"
 Acta Cryst. A 34 , 553 - 555 , 1978
- [39] Schwarzenberger, R.L.E.
 "N-dimensional crystallography"
 Pitman Advanced Publishing Program, London, 1980
- [40] Senechal, M.
 "Color Groups"
 Discrete Applied Mathematics, 1 , 51 - 73 , 1979
- [41] Shubnikov, A.
 "Ueber die Symmetrie des Kontinuums"
 Z.Krist. 72 , 273 - 290 , 1929

- [42] Shubnikov, A.
✓ "Ueber die Symmetrie des Semikontinuums"
Z.Krist. 73 , 430 - 433 , 1930
- [43] Van der Waerden, B.L. und Burckhardt, J.
"Farbgruppen"
Z.Krist. 115 , 231 - 234 , 1961
- [44] Weyl, H.
"Symmetry"
Princeton University Press, 1952
- [45] Wondratschek, H. und Neubüser, J.
Tabellen der maximalen Untergruppen von Raumgruppen
private Mitteilung, unveröffentlicht
- [46] Yale, P.B.
"Geometry and Symmetry"
Holden Day, San Francisco, 1968

Die vorliegende Arbeit benutzt häufig die Gruppen A aller affinen Transformationen und die Gruppe E aller Isometrien des n -dimensionalen reell-affinen euklidischen Raumes $\mathbb{R}_n$. Wir möchten hier ein Minimum von der Geometrie und der Algebra dieser Gruppen vermitteln, indem wir sie gleich mit ihrer ganzen "Verwandtschaft" vorstellen. Wir verwenden dafür die folgenden üblichen Bezeichnungen:

- $S(\mathbb{R}_n)$ für die "volle symmetrische Gruppe" von $\mathbb{R}_n$, also für die Gruppe aller Selbstbijektionen der Menge $\mathbb{R}_n$, was dasselbe ist wie die Gruppe aller Permutationen der Punkte in $\mathbb{R}_n$.
- $C(\mathbb{R}_n)$ für die Gruppe aller stetigen Permutationen von $\mathbb{R}_n$ (C von "continuous"). Diese Abbildungen erhalten die "Nachbarschaft" von Punkten.
- A_n für die Gruppe aller affinen Transformationen. Diese bilden Geraden auf ebensolche ab und erhalten die Parallelität von Strecken. Daher werden affine Unterräume auf ebensolche derselben Dimension abgebildet. Affine Abbildungen sind stetig.
- P_n für die Gruppe aller volumenerhaltenden affinen Transformationen (Coxeter nennt sie "procrustean stretches", daher P von Prokrustes). Volumenerhaltend ist gleichbedeutend damit, dass die Determinante ± 1 beträgt.
- S_n für die Gruppe aller Ähnlichkeiten (englisch: Similarities). Ähnlichkeiten sind affine Transformationen, welche Längenverhältnisse erhalten (z.B. Drehstreckungen).

Als Transformationsgruppen des Raumes $\mathfrak{R}_n$ im engeren Sinne gelten nur die Untergruppen von A_n . Bei der Beschreibung dieser Gruppen haben wir gesehen, dass sich jede dadurch charakterisieren lässt, dass sie eine bestimmte geometrische Eigenschaft invariant lässt (Parallelität, Volumen, Längenverhältnisse, Winkel, Richtungen, Längen). Wenn man nun tiefer in die Geometrie einsteigt, wird man die Normalformen der Transformationen untersuchen und herleiten, wie man z.B. jede Ähnlichkeit in ein Produkt von höchstens je einer Zentralstreckung, Rotation, Translation und Spiegelung zerlegt etc. Interessenten seien die Bücher von Coxeter [17] und Yale [46] als Auswahl dringend empfohlen.

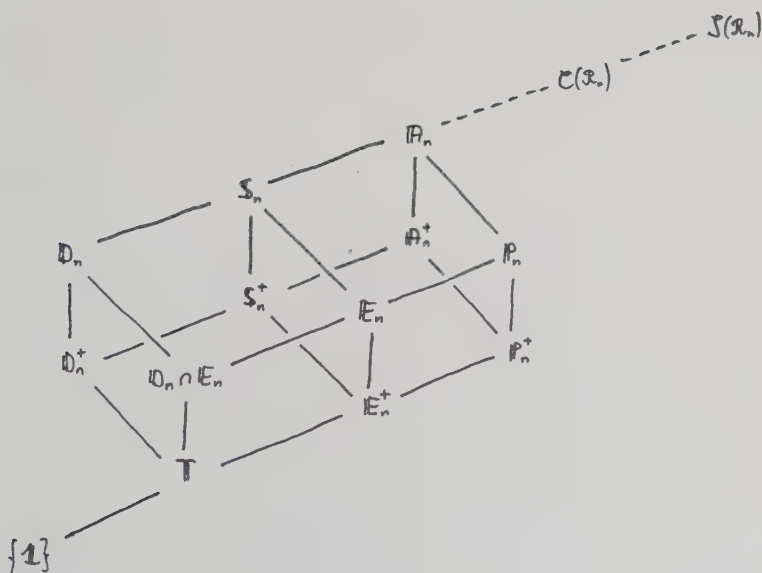
Nun wollen wir noch kurz die Algebra dieser Gruppen streifen. Im Abschnitt 2.1 haben wir die Projektion $\sim$ von A_n auf $GL_n(\mathbb{R})$ beschrieben, deren Kern die Gruppe T_n aller Translationen ist. Dieselbe Projektion lässt sich auch auf alle unsere Untergruppen von A_n anwenden, und immer erscheint die Gruppe T_n als Kern. Tatsächlich zerfallen diese Gruppen alle über ihrem Normalteiler T_n in ein semi-direktes Produkt (das oben erwähnte Buch von Yale enthält auch eine für Kristallographen gut geeignete Einführung in die Gruppentheorie). T_n ist isomorph zu $\mathbb{R}^n$, somit haben wir die folgenden Gruppenisomorphismen (per Wahl einer affinen Basis):

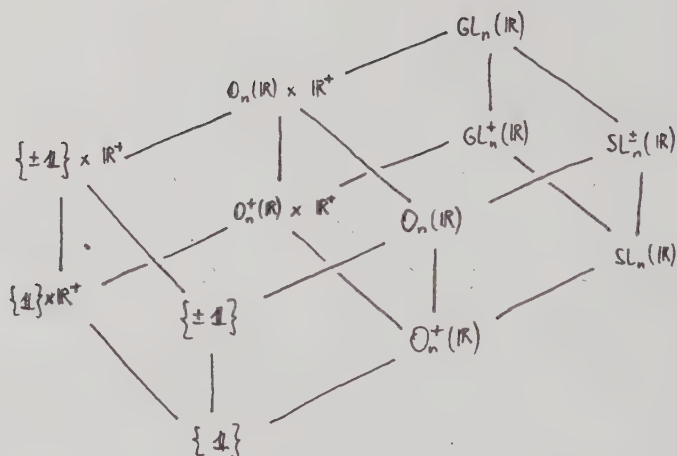
$$\begin{array}{ll}
 A_n \cong \mathbb{R}^n \ltimes GL_n(\mathbb{R}) & A_n^+ \cong \mathbb{R}^n \ltimes GL_n^+(\mathbb{R}) \\
 P_n \cong \mathbb{R}^n \ltimes SL_n^+(\mathbb{R}) & E_n^+ \cong \mathbb{R}^n \ltimes SL_n(\mathbb{R}) \\
 S_n \cong \mathbb{R}^n \ltimes (O_n(\mathbb{R}) \times \mathbb{R}^+) & S_n^+ \cong \mathbb{R}^n \ltimes (O_n^+(\mathbb{R}) \times \mathbb{R}^+) \\
 E_n \cong \mathbb{R}^n \ltimes O_n(\mathbb{R}) & E_n^+ \cong \mathbb{R}^n \ltimes O_n^+(\mathbb{R}) \\
 D_n \cong \mathbb{R}^n \ltimes (\pm 1 \cdot \mathbb{R}^+) & D_n^+ \cong \mathbb{R}^n \ltimes \mathbb{R}^+ \\
 D_n \cap E_n \cong \mathbb{R}^n \ltimes \pm 1 & (D_n \cap E_n)^+ = T_n \cong \mathbb{R}^n
 \end{array}$$

Unsere Projektion $\sim$ bildet also den obigen Verband auf den folgenden Verband von Punktgruppen ab:

- E_n für die Gruppe aller Isometrien (E wie Euklid).
Isometrien erhalten die gesamte Metrik des $\mathbb{R}_n$, insbesondere also auch Längen, Winkel und Volumen.
- D_n für die Gruppe aller Dilatationen. Dilatationen sind solche affine Transformationen, welche die Richtungen von Geraden unverändert lassen. Man zeigt, dass die Dilatationen spezielle Ähnlichkeiten sind (Zentralstreckungen und Translationen).
- T_n für die Gruppe aller Translationen. Diese erhalten schlichtweg alles von der Geometrie eines Gebildes (Richtungen, Winkel, Längen, Volumen) und ändern nur dessen absolute Lage.

Ueberdies haben wir zu jeder dieser Gruppen noch die entsprechende $+$ -Gruppe, indem wir nur Transformationen mit positiver Determinante zulassen. Das folgende Verbandsdiagramm beschreibt die Untergruppenbeziehungen all dieser Transformationsgruppen:





Alle Gruppen in der hinteren Längswand dieser Kiste gehen aus den entsprechenden der vorderen hervor durch Bildung des direkten Produkts mit der Gruppe

$$\text{Zentrum}(GL_n(\mathbb{R}))^+ = \{\lambda \cdot 1 \mid \lambda \in \mathbb{R}^+\} \cong \mathbb{R}^+$$

Bei ungeraden Dimensionszahlen n (also auch bei $n = 3$) erhalten wir den Deckel dieser Kiste aus dem Boden, indem wir zu jeder Gruppe im Boden das direkte Produkt mit der Gruppe $\{\pm 1\}$ bilden.

Zur Definition der Topologie auf der Gruppe A betrachten wir die folgenden Mengen:

$$\begin{array}{ll}
 \mathbb{R}^{n^2} & \text{Menge aller } n^2\text{-Tupel von reellen Zahlen} \\
 \uparrow f \\
 \mathbb{R}^{n \times n} & \text{Menge aller quadratischen } n \times n\text{-Matrizen über } \mathbb{R} \\
 \uparrow j \\
 GL_n(\mathbb{R}) & \text{Menge aller invertierbaren } n \times n\text{-Matrizen} \\
 \uparrow i \\
 [A_{n-1}] & \text{Menge aller } n \times n\text{-Matrizen der Gestalt } \begin{bmatrix} A \in GL_{n-1} & \begin{matrix} t_1 \\ \vdots \\ t_{n-1} \end{matrix} \\ 0 \dots 0 & 1 \end{bmatrix}
 \end{array}$$

Es ist natürlich $[A_{n-1}] \cong A_{n-1}$, der Isomorphismus wird durch die Wahl irgendeiner affinen Basis gegeben. i und j sollen für die Inklusionen der Teilmengen $[A_{n-1}]$ resp. $GL_n(\mathbb{R})$ stehen. f sei definiert durch

$$f((a)_{ij}) = (a_{11}, a_{12}, \dots, a_{1n}, a_{21}, \dots, a_{nn-1}, a_{nn})$$

f vermittelt offenbar eine Bijektion zwischen $\mathbb{R}^{n \times n}$ und $\mathbb{R}^{n^2}$. $\mathbb{R}^{n^2} = \mathbb{R}^m$ ist aber als metrischer Raum bekannt, und die Bijektion f überträgt die Metrik von $\mathbb{R}^{n^2}$ auf $\mathbb{R}^{n \times n}$.

Als Abstand zweier Matrizen können wir also die Zahl

$$\max_{i,j} \|a_{ij} - b_{ij}\| \quad i, j \leq n$$

definieren. Eine Folge von Matrizen konvergiert also gegen eine Grenzmatrix M , wenn für jede Stelle ij die entsprechende Zahlfolge gegen den ij -ten Koeffizienten von M konvergiert.

Dieselbe Distanzfunktion und derselbe Konvergenzbegriff ist damit aber auch auf $[A_{n-1}] \subset GL_n(\mathbb{R}) \subset \mathbb{R}^{n \times n}$ definiert, $[A_{n-1}]$ und $GL_n(\mathbb{R})$ sind somit auch metrische Räume ("metrische Unterräume"). Jeder Gruppenisomorphismus von $[A_{n-1}]$ auf A_{n-1} über-

trägt die metrische Struktur auf A_{n-1} . Derart wird A_{n-1} zu einer *abgeschlossenen* Teilmenge von $GL_n(\mathbb{R})$ (nicht aber von $\mathbb{R}^{n \times n}$!), und $GL_n(\mathbb{R})$ zu einer *offenen* Teilmenge von $\mathbb{R}^{n \times n}$.

Die Gruppe A und damit auch ihre Untergruppen sind jetzt also auch topologische (sogar metrische) Räume. Eine Gruppe heisst aber erst dann eine *topologische Gruppe*, wenn sie erstens ein topologischer Raum ist und zweitens die Abbildungen

$$\begin{aligned} \cdot : G \times G &\longrightarrow G \\ (g, h) &\longmapsto g \cdot h \end{aligned}$$

sowie
$$\begin{aligned} {}^{-1} : G &\longrightarrow G \\ g &\longmapsto g^{-1} \end{aligned}$$

stetig sind. Dies ist durch unsere Definitionen für A und ihre Untergruppen erfüllt. Als Untergruppen von topologischen Gruppen werden nur noch *abgeschlossene Untergruppen* betrachtet.

Entsprechend werden als Abbildungen die *stetigen Gruppenhomomorphismen* betrachtet. Die Konjugation mit Elementen aus A vermittelt solche. Für jede Transformationsgruppe $F \subset A_n$ haben wir überdies die folgenden wichtigen stetigen Gruppenhomomorphismen:

$$\begin{aligned} \sim : F &\longrightarrow \tilde{F} \subset GL(\tilde{\mathbb{R}}_n) \\ (A, a) &\longmapsto A \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \det : F &\longrightarrow (\mathbb{R} \setminus \{0\}, \cdot) \\ (A, a) &\longmapsto \det(A) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \|\det\| : F &\longrightarrow (\mathbb{R}^+, \cdot) \\ (A, a) &\longmapsto \|\det(A)\| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{sign} \circ \det : F &\longrightarrow \{+1, -1\} \\ (A, a) &\longmapsto \text{sign}(\det(A)) \end{aligned}$$

Da z.B. $\sim$ stetig ist, ist der Kern($\sim$) = $F \cap T = \tilde{F}$ immer eine abgeschlossene normale Untergruppe von F . Ebenso ist etwa der Kern von $\|\det\| : A \longrightarrow \mathbb{R}^+$, also P , eine normale abgeschlossene Untergruppe von A , usw.

Der folgende wichtige Satz wäre falsch ohne die Einschränkung auf topologisch abgeschlossene Gruppen:

Satz: Sei F eine abgeschlossene Untergruppe von A_n .
 Dann ist $\Gamma_F = F \cap T$ eine abgeschlossene normale Untergruppe von F , und es existieren m linear unabhängige Translationen $t_1, \dots, t_m$ ($m \leq n$) sodass gilt

$$\Gamma_F = R \cdot t_1 \oplus R \cdot t_2 \oplus \dots \oplus R \cdot t_k \oplus [Z \cdot t_{k+1} \oplus \dots \oplus Z \cdot t_m]$$

$$\text{also } \Gamma_F = \underbrace{KK \dots K}_{k \text{ mal}} \underbrace{DD \dots D}_{m-k \text{ mal}} \underbrace{OO \dots O}_{n-m \text{ mal}}$$

In seinem schönen Buch "n-dimensional crystallography" zeigt Schwarzenberger, wie fruchtbar die Verwendung von topologischen Begriffen schon bei der Diskussion von Raumgruppen ist. Spätestens dann wird die Topologie aber unumgänglich, wenn man auch von teilweise kontinuierlichen und kontinuierlichen Symmetriegruppen präzise sprechen will (wie etwa Buchmann in seiner Diplomarbeit [15]).

Die Hermann-Mauguin-Notation eignet sich ausgezeichnet, um diskrete (kristallographische) Symmetriegruppen mit einem kurzen und aussagekräftigen Symbol zu charakterisieren. Will man aber auch teilweise kontinuierliche und kontinuierliche Gruppen von Translationen resp. Isometrien notieren, muss man diese Symbolik erweitern. In der vorliegenden Arbeit haben wir dazu den Vorschlag von Buchmann ([15] und persönliche Mitteilung) aufgegriffen. Da die Originalarbeit von Buchmann praktisch unzugänglich ist, stellen wir seine Erweiterung der H-M-Notation hier kurz vor. Sie hat den grossen Vorteil einfach zu sein und lässt sich am besten anhand einiger Beispiele erklären.

Sei also eine Raumgruppe G gegeben, und wir wollen die Translationsgruppe einer Untergruppe oder Uebergruppe (z.B. einer Normalisatorgruppe) von G beschreiben. Dazu beziehen wir uns auf eine konventionelle Basis $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ von Γ_G und schreiben

DDK	für	$\mathbb{Z} \cdot \vec{a} + \mathbb{Z} \cdot \vec{b} + \mathbb{R} \cdot \vec{c}$
KKO	für	$\mathbb{R} \cdot \vec{a} + \mathbb{R} \cdot \vec{b} + 0 \cdot \vec{c}$
DOD	für	$\mathbb{Z} \cdot \vec{a} + 0 \cdot \vec{b} + \mathbb{Z} \cdot \vec{c}$
DDD	für	$\mathbb{Z} \cdot \vec{a} + \mathbb{Z} \cdot \vec{b} + \mathbb{Z} \cdot \vec{c}$

etc.

Die Grossbuchstaben D, K und O beziehen sich dabei auf die Vektoren $\vec{a}, \vec{b}$ und $\vec{c}$ (in dieser Reihenfolge !) und geben an, ob die Translationsgruppe in dieser Richtung diskret (D), kontinuierlich (K) oder Null ist (O wie Null, aber gelesen als Grossbuchstabe). Hier ist es nun schon entscheidend, dass wir nur topologisch abgeschlossene Gruppen betrachten, sonst hätten wir ja nicht nur diese drei Möglichkeiten von eindimensionalen Translationsgruppen (vgl. Appendix B).

Mit der Anzahl der Grossbuchstaben aus D,K,O können wir gleichzeitig noch die Dimension des Raumes, in dem wir arbeiten, genau festlegen:

- DDO 112 steht für eine bestimmte *Schichtgruppe* im dreidimensionalen Raum,
 DD 2 bezeichnet die ebene (zweidimensionale) Raumgruppe $p2$, und
 DDK 112 bezeichnet eine teilweise kontinuierliche Obergruppe der dreidimensionalen Raumgruppe $P 2 \cong DDD 112$

Allfällige Aenderungen des Koordinatensystems können wir, bezogen auf die Basis $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$, immer mit einer 3×3 -Matrix beschreiben, indem wir notieren

$$M(\text{DDK}) \quad \text{für} \quad \mathbf{Z} \cdot M(\vec{a}) + \mathbf{Z} \cdot M(\vec{b}) + \mathbf{R} \cdot M(\vec{c})$$

Beispiel:

$$M = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad M(\text{DDK}) = \mathbf{Z} \cdot \frac{\vec{a} + \vec{b}}{2} + \mathbf{Z} \cdot \frac{\vec{b} - \vec{a}}{2} + \mathbf{R} \cdot \frac{\vec{c}}{2}$$

eine Translationsgruppe, die häufig gebraucht wird im tetragonalen System

Halbierungen von Gittertranslationen oder andere einfache Fälle der Matrix M können auch durch Indices angedeutet werden:

$$D_2D_2K \quad \text{für} \quad \mathbf{Z} \cdot \frac{1}{2}\vec{a} + \mathbf{Z} \cdot \frac{1}{2}\vec{b} + \mathbf{R} \cdot \vec{c}$$

Zentrierungen werden wo nötig durch den üblichen Grossbuchstaben festgelegt, den wir dem Translationsgruppensymbol in Klammern beifügen:

$$\begin{aligned} DDD(I) & \quad \text{für ein I-zentriertes dreidimensionales Gitter} \\ DDO(C) & \quad \text{für} \quad \mathbf{Z} \cdot \vec{a} + \mathbf{Z} \cdot \vec{b} + \mathbf{Z} \cdot \frac{\vec{a} + \vec{b}}{2} \\ DDK(C) & \quad \text{für} \quad \mathbf{Z} \cdot \vec{a} + \mathbf{Z} \cdot \vec{b} + \mathbf{R} \cdot \vec{c} + \mathbf{Z} \cdot \frac{\vec{a} + \vec{b}}{2}, \text{ das} \\ & \quad \text{ist gerade unsere Gruppe } M(\text{DDK}) \text{ aus} \\ & \quad \text{dem obigen Beispiel!} \end{aligned}$$

Dabei wird (P) für eine primitive Basis meist weggelassen, es ist also $DDO = DDO(P)$. Derart können wir nun alle irgendwo auftauchenden abgeschlossenen Translationsgruppen, bezogen auf eine vorgegebene Gruppe G, präzise notieren.

Dem Symbol für die Translationsgruppe fügen wir schliesslich noch das übliche Hermann-Mauguin-Symbol hinzu. Dieses charakterisiert die rotativen Anteile und Gleitkomponenten einiger zusätzlichen erzeugenden Transformationen der Gruppe von Isometrien, die wir beschreiben wollen.

Beispiel: $\text{OOK } \frac{422}{mmm}$ bezeichnet die Symmetriegruppe einer homogenen quadratischen Säule, die in der Richtung der vierzähligen Achse unendlich lang ist. Man beachte dabei dass sich die Buchstaben OOK auf eine konventionelle tetragonale Basis $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ mit $|\vec{a}| = |\vec{b}|$, alle Winkel 90° beziehen, während der H-M-Teil des Symbols die Blickrichtungen $\vec{c}, \vec{a}, \vec{a}+\vec{b}$ der Punktgruppe (in dieser Reihenfolge) als Bezugsrichtungen hat.

Ein weiteres Beispiel für die Anwendung der H-M-B-Symbolik findet sich am Schluss von Abschnitt 1.5. Dort wird als Symmetriegruppe eines unendlich ausgedehnten Wellblechs die Gruppe $\text{DKO } \frac{2122}{m\ ma}$ abgeleitet.

Als Einführung in die Hermann-Mauguin-Symbolik liest man am besten die Originalpublikationen [24, 33, 28] oder die einleitenden Kapitel der International Tables [23].

Curriculum Vitae

Am ersten März des Jahres 1955 wurde ich, Martin Gottlieb Gubler, in meinem Bürgerort Müllheim geboren. Pflichtgemäss absolvierte ich dort auch sechs Primarschuljahre. Anschliessend besuchte ich sechseinhalb lange Jahre das Gymnasium im Kantonshauptort Frauenfeld. Am 21. September 1973 überreichte mir Oberst und Rektor H. Jung das Maturitätszeugnis Typus B. Nach einem Wanderjahr nahm ich im Wintersemester 74/75 das Studium der Mathematik an der Universität Zürich auf, welches ich am 9. November 1978 mit dem Diplom abschloss. Prof. A. Niggli, mein Dozent im "kleinen" Nebenfach Kristallographie, ermöglichte es mir dann im Rahmen eines Forschungsprojekts der ETH Zürich, die Studien in mathematisch/kristallographischer Richtung weiterzuführen. Meine beiliegende Dissertation entstand in dieser Zeit unter seiner Leitung.

Von den Dozenten, deren Vorlesung ich gehört habe, möchte ich besonders meinem Diplomvater Prof. H. Gross und Prof. P. Gabriel im Hauptfach sowie Frau Prof. V. Meyer, Prof. W.M. Meier und Prof. A. Niggli in den Nebenfächern danken. Ebenso wichtig war für mich auch der Besuch von Vorlesungen der ersten philosophischen Fakultät, wo ich vor allem Prof. M. Erdheim und Dr. S. Johansson erwähnen möchte.

Bei den folgenden Professoren und Lehrbeauftragten habe ich Vorlesungen besucht oder an deren Übungen teilgenommen:

phil II

Prof. Dr. P. Hess
Prof. Dr. H.H. Storrer
Prof. Dr. H.H. Keller
Prof. Dr. F. Waldner
Prof. Dr. V. Meyer
Prof. Dr. V. Strassen
Prof. Dr. H. Gross
Prof. Dr. P. Gabriel
Prof. Dr. F. Ulmer
Dr. W. Baur
Prof. Dr. K. Strebel
Prof. Dr. W.M. Meier
Prof. Dr. H. Läubli
Prof. Dr. A. Niggli
PD Dr. M. Fehlmann
Dr. K. Girgis
Prof. Dr. W. Petter
Dr. V. Gramlich
Dr. G. Mazzola

phil I

Prof. Dr. D. v.Uslar
Prof. Dr. W. Binder
Prof. Dr. A. Haas
Dr. S. Johansson
Prof. Dr. P. Seidmann
Prof. Dr. W. Heitler
Prof. Dr. M. Erdheim
Prof. Dr. L. Löffler

Herstellung: Ruckstuhl, CH-8581 Schocherswil

Verlag: Eigenverlag Martin Gubler, CH-8552 Felben

© Alle Rechte beim Autor.